

**ZUR THEORIE DER KOLLEKTIVEN ROTATIONEN
VON QUANTENMECHANISCHEN VIELTEILCHEN-
SYSTEMEN UNTER BESONDERER BERÜCK-
SICHTIGUNG DEFORMIERTER GG-KERNE**

von
Heinz Herold
aus
Nürnberg

1976



Digitized by the Internet Archive
in 2026

**ZUR THEORIE DER KOLLEKTIVEN ROTATIONEN
VON QUANTENMECHANISCHEN VIELTEILCHEN-
SYSTEMEN UNTER BESONDERER BERÜCK-
SICHTIGUNG DEFORMierter GG-KERNE**

**Den Naturwissenschaftlichen Fachbereichen
der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg**

zur

Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt

von

Heinz Herold

aus

Nürnberg

Als Dissertation genehmigt von den Naturwissenschaftlichen
Fachbereichen der Universität Erlangen-Nürnberg

Tag der mündlichen Prüfung: 24. November 1976

Vorsitzender der Promotionskommission: Prof. Dr. E. Schweizer

Erstberichterstatter: Prof. Dr. H. Volz

Zweitberichterstatter: Wiss. Rat Dr. H. Ruder

Bei Herrn Professor Dr. H. Volz möchte ich mich an dieser Stelle für die Überlassung des sehr interessanten Themas und für die in zahlreichen Diskussionen und Gesprächen gegebenen Anregungen bedanken.

Mein herzlicher Dank gilt aber auch Herrn Dr. H. Ruder, der durch sein großes Interesse und durch viele fruchtbare Vorschläge zum Fortgang der Arbeit wesentlich beigetragen hat.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

Teil A : Allgemeine Behandlung von kollektiven Rotationen in quantenmechanischen N-Teilchen-Systemen

- I. Transformation des Hamiltonoperators auf kollektive und innere Koordinaten
 1. Koordinaten und Operatoren
 2. Transformation des Linearimpulses, Mitföhrungs-koeffizienten
 3. Transformation des Hamiltonoperators
 4. Struktur der Eigenfunktionen
- II. Veränderung des körperfesten Koordinatensystems
 1. Transformation der elementaren Impulse
 2. Transformation des Hamiltonoperators
 3. Transformation der Wellenfunktionen
- III. Beschreibung der kollektiven Rotationen
 1. Störungsrechnung nach J und spezifische Entkopplung
 2. Äquivalentes Extremalprinzip
 - a) Variation des Trägheitstensors $\langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle$
 - b) Extremalprinzip für das gesamte Rotationsmultiplett
 - c) Extremalprinzip für einen einzelnen Rotationszustand
 3. Spezialisierung auf (K=0)-Banden

Teil B : Anwendung der spezifischen Entkopplung auf
das Rotor + Particle - Modell

- I. Allgemeine Beschreibung und Störungsrechnung
 - 1. Koordinaten und Hamiltonoperator
 - 2. Störungsrechnung nach J
- II. Behandlung durch spezifische Entkopplung
 - 1. Veränderung des körperfesten Systems und
Extremalprinzip
 - 2. Die Extremalgleichungen für den Grenzfall
 $\Theta_0 \rightarrow \infty$
 - 3. Lösung durch Vergleich mit der Störungsrechnung
(Spezifische Entkopplung der Wellenfunktionen)
 - 4. Direkte Lösung des Extremalprinzips

Teil C : Anwendung der allgemeinen Theorie auf
deformierte gg-Kerne

- I. Intrinsisch-deformierte Wellenfunktionen
 - 1. Körperfeste Koordinaten
 - 2. Struktur der Wellenfunktionen
(Intrinsic-Wellenfunktionen)
 - 3. Intrinsic-Hamiltonoperator
 - a) Umrechnung der Linearimpulse
 - b) Berechnung des Intrinsic-Hamiltonoperators
 - 4. Eigenfunktionen des Intrinsic-Hamiltonoperators
 - a) Transformation von H^{intr} auf q' und Ω'
 - b) Struktur der Eigenfunktionen
 - c) Deformierte Wellenfunktionen

II. Vergleich mit der Translation

1. Anwendung der Theorie der Intrinsic-Wellenfunktionen auf die Translation

a) Allgemeine Theorie

b) Koordinaten, Intrinsic-Wellenfunktionen und Intrinsic-Hamiltonoperator

2. Vergleich von Rotation und Translation

III. Behandlung der kollektiven Rotationen

1. Extremalprinzip der spezifischen Entkopplung mit Intrinsic-Wellenfunktionen

2. Spezialisierung auf ($K=0$)-Banden

a) Näherungen im Fall starker Deformation

b) Lösung des Extremalproblems

3. Allgemeiner Fall : asymmetrischer Kreisel

4. Begründung der Näherungen im Fall starker Deformation

a) Kleinwinkelnäherung

b) Mittelung der Mitdrehbedingungen

Zusammenfassung

Teil D : Anhang

I. Eulersche Winkel und Drehimpulse

II. Kreiselfunktionen und ihre Eigenschaften

III. Hermitizität der Terme von H

IV. Zur Variation von E_{rot}

- V. Mitführungskoeffizienten in Eulerschen Winkeln
- VI. Eigenschaften von S_1 , S_2 und Trägheitstensor bei $(K=0)$ -Banden
- VII. Zur Transformation des körperfesten Systems im Rotor + Particle - Modell
- VIII. Berechnung des Intrinsic-Hamiltonoperators
- IX. Zur Umrechnung von H^{intr} auf q' und Ω'
- X. Modellrechnungen : Deformierter Oszillator
- XI. Zur Untersuchung der Mittelungsnäherung

Einleitung

Das Problem der theoretischen Beschreibung von Atomkernen, die kollektive Rotationszustände besitzen, wurde bereits von sehr vielen Autoren behandelt. Die Tatsache, daß die Publikation von Arbeiten zu dieser Frage bis heute keineswegs abreißt (eine Auswahl ist in den Zitaten [1 - 39] gegeben), zeigt, daß eine vollständig überzeugende Klärung dieses Problems offenbar noch nicht erreicht worden ist.

Modelle, bei denen sich die einzelnen Teilchen (oder Quasiteilchen) unabhängig in einem selbstkonsistent erzeugten, mittleren Potential bewegen, sind sehr gut dazu geeignet, nicht-kollektive Phänomene wie z. B. Einteilchenanregungen, gewisse Grundzustandseigenschaften wie Spin und Parität bei Kernen mit ungerader Massenzahl etc. zu erklären. In weiten Massenzahlbereichen muß man dabei ein deformiertes Kernpotential verwenden (vgl. Nilsson [40]). Solchermaßen aufgebaute Zustände verletzen dann natürlich die Drehinvarianz, sie besitzen keinen scharfen Drehimpuls. Deshalb kann sich bei deformierten Kernen die Beschreibung durch unabhängige Teilchen allein auf die innere Struktur des Kerns beziehen, während die kollektiven Rotationen ein zusätzliches Phänomen darstellen.

Das zuletzt genannte Problem wurde zuerst von Bohr und Mottelson in einer halbphänomenologischen Theorie behandelt [1,2]. Ein wesentlicher Punkt dabei ist, daß man zur Beschreibung der kollektiven Rotationsfreiheitsgrade ein sogenanntes körperfestes Koordinatensystem benötigt, dessen Drehung den Bewegungszustand des gesamten Kerns repräsentiert. Auch die Versuche, auf Grund mikroskopischer Vorstellungen ein solches Bezugssystem ein-

zuführen, reichen schon weit zurück. So wurde z.B. von Villars [11] gezeigt, daß sich die Hamiltonfunktion bei Einführung eines beliebigen, an die Punktkonfiguration geknüpften körperfesten Systems in einen inneren, einen kollektiven und einen Kopplungsanteil zerlegen läßt. Allerdings wurde von diesen Resultaten in der Folgezeit recht wenig Gebrauch gemacht, da die meisten Autoren das körperfeste System mit den Hauptträgheitsachsen der jeweiligen Punktkonfiguration identifizieren (vgl. z.B. [10,32]). Bei dieser Definition des inneren Bezugssystems bleibt eine starke Kopplung zwischen innerer Bewegung und kollektiver Rotation bestehen. Wenn der Kopplungsanteil vernachlässigt wird, ergibt sich das schon im Tröpfchenmodell gefundene "hydrodynamische" Trägheitsmoment, das sich bekanntlich beim Vergleich mit dem Experiment als wesentlich zu klein erweist. Deshalb wurden andere Methoden, wie zeitabhängige Hartree-Fock-Theorie oder die entsprechende RPA-Behandlung [18] auf dieses Problem angewandt. Dies führt auf die (selbstkonsistente) Cranking-Formel [17] , die recht gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten für die Trägheitsmomente ergibt [41,42]. Allerdings ist die Anwendung der genannten Methoden auf das Problem der kollektiven Rotationen problematisch, weil dabei die Voraussetzung kleiner Schwingungen (um den HF-Grundzustand) eingeht, so daß die theoretische Fundierung der Resultate etwas fragwürdig erscheint.

Das ursprüngliche (und sehr anschauliche) Konzept des körperfesten Koordinatensystems wurde nun in jüngster Zeit von Ruder und Volz mit Erfolg wieder aufgegriffen und zu einer Theorie der kollektiven Rotationen entwickelt, die eine grundlegende Klärung dieses Problems darstellt [43 - 46] . Der wesentliche Unterschied zu den früheren Versuchen besteht darin, die Definition des körperfesten

Systems von dem Ausgangszustand abhängig zu machen, auf dem sich kollektive Rotationszustände aufbauen. Dadurch ist es möglich, die Entkopplung zwischen innerer Bewegung und Rotation zu erreichen (sog. spezifische Entkopplung).

Diese auf beliebige quantenmechanische Teilchensysteme anwendbare Theorie wird in Teil A dieser Arbeit in ihrem allgemeinen Formalismus dargestellt. Teil B beschreibt die Anwendung auf das Rotor + Particle - Modell. Das Ziel von Teil C ist die Behandlung der kollektiven Rotationen deformierter gg -Kerne, aufbauend auf der allgemeinen Theorie. Zu diesem Zweck muß die Frage der mikroskopischen Beschreibung von deformierte Zuständen geklärt werden. Dabei wird auch die Bedeutung der anfangs erwähnten Modelle unabhängiger (Quasi-)Teilchen aufgezeigt. Aufbauend auf diesen Ergebnissen können dann die kollektiven Rotationszustände deformierter gg -Kerne beschrieben werden. Insbesondere wird diskutiert, wann sich für das Trägheitsmoment von Rotationsbanden die Cranking-Formel ergibt. Dadurch ist es möglich, die Anwendung dieser (ursprünglich semiklassischen) Formel auf eine sichere Grundlage zu stellen.

Teil A

Allgemeine Behandlung von kollektiven Rotationen in quantenmechanischen N-Teilchen-Systemen

I. Transformation des Hamiltonoperators auf kollektive und innere Koordinaten

1. Koordinaten und Operatoren

Wir betrachten ein System von N Massenpunkten mit den Massen m_i ($i = 1, \dots, N$), die durch die Ortsvektoren $\underline{x}_i$ im raumfesten Koordinatensystem (x, y, z) beschrieben werden.

Diese $3N$ Koordinaten $x_{i\mu}$ ($\mu = x, y, z$) ersetzen wir durch Koordinaten, die den kollektiven Bewegungsmöglichkeiten des Systems besser angepaßt sind :

- (i) Zur kollektiven Translation (Bewegung des Schwerpunkts) gehören die Schwerpunktskoordinaten

$$Q_\mu = \sum_i \frac{m_i}{M} x_{i\mu} \quad (M = \sum_i m_i : \text{Gesamtmasse})$$

- (ii) Zur Beschreibung der kollektiven Rotationen dient ein Koordinatensystem, das in eindeutiger Weise mit der jeweiligen Punktkonfiguration verknüpft ist, das sog. körperfeste System. Seine Achsenrichtungen sind gegeben durch die drei Einheitsvektoren $\underline{e}_a$ ($a = 1, 2, 3$). Äquivalent dazu ist die Angabe der drei Eulerschen Winkel

$$\Omega = (\alpha, \beta, \gamma) ,$$

die die Orientierung der Gesamtkonfiguration gegenüber dem raumfesten System bestimmen.

Von diesem inneren Bezugssystem setzen wir (neben seiner Translationsinvarianz) nur voraus, daß

es körpergebunden ist, sich also bei einer Drehung des Gesamtsystems (um den Schwerpunkt) in entsprechender Weise mitdreht. Dies drückt sich mathematisch durch die "Vektoreigenschaft" der Einheitsvektoren $\underline{e}_a$ aus :

$$[J_\mu, e_{a\nu}] = i\hbar \epsilon_{\mu\nu\lambda} e_{a\lambda} \quad *) \quad (A,1)$$

Dabei sind J_μ die raumfesten Drehimpulskomponenten, die die normalen Vertauschungsrelationen erfüllen. Die körperfesten Drehimpulskomponenten

$$J_a = \underline{e}_a \cdot \underline{J} \quad (A,2)$$

erfüllen dagegen die anomalen Vertauschungsrelationen (zu diesen und weiteren Eigenschaften vgl. Anhang D.I).

Die Frage der optimalen Wahl dieses körperfesten Bezugssystems ist ein wesentlicher Punkt der späteren Abschnitte.

- (iii) Die restlichen $3N-6$ Freiheitsgrade beschreiben wir durch $3N-6$ innere Koordinaten

$$q_j \quad (j = 1, \dots, 3N-6) \quad ,$$

die die Struktur des Gesamtsystems unabhängig von seiner Lage und Orientierung im Raum festlegen. Diese translations- und drehinvarianten Koordinaten lassen sich z.B. repräsentieren durch Abstände zwischen einzelnen Teilchen, Winkel zwischen Verbindungsvektoren zweier Teilchen etc.

In den nächsten Abschnitten wird nun der Hamiltonoperator auf die angegebenen neuen Koordinaten umgerechnet.

*) Summationskonvention : Über mehrfach vorkommende Indizes wird stets summiert.

2. Transformation des Linearimpulses, Mitführungs- koeffizienten

Der Hamiltonoperator besteht aus dem kinetischen und dem potentiellen Anteil. Wenn keine äußeren Felder vorliegen, hängt der potentielle Anteil nur von den inneren Koordinaten ab. Seine funktionale Gestalt

$$V_{ww} = V_{ww}(q) \quad (A,3)$$

ist zwar erst bei bestimmten inneren Koordinaten q wohldefiniert, ist jedoch gegenüber Translationen und Rotationen des Gesamtsystems invariant.

Die kinetische Energie

$$T_{\text{ges}} = \sum \frac{1}{2m_i} p_i^2 \quad (A,4)$$

enthält den Linearimpuls $p_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}$ eines Teilchens, den wir zuerst auf die neuen Koordinaten Q , q und Ω transformieren.

Dies könnte geschehen durch systematische Umrechnung des Differentialoperators $\frac{\partial}{\partial x_i}$. Zur Vermeidung dieser etwas längeren Prozedur gehen wir anders vor (vgl. [47]):

Wir benützen die bekannten Zusammenhänge zwischen infinitesimalen Verrückungen und den entsprechenden quantenmechanischen Operatoren, also zwischen Impuls und translatorischer Verrückung sowie zwischen Drehimpuls und infinitesimaler Verdrehung.

So führt eine infinitesimale Verschiebung des Teilchens i um die Strecke Δ in Richtung der (beliebigen) körperfesten Achse $\underline{e}_a$ zu einer Veränderung des Ortsvektors $\underline{x}_i$:

$$\underline{x}_i \rightarrow \underline{x}_i + \delta \underline{x}_i \quad \text{mit} \quad \delta \underline{x}_i = \underline{e}_a \cdot \Delta \quad (A,5)$$

Damit verbunden ist eine Veränderung

- a) der Schwerpunktskoordinaten : $\underline{Q} \rightarrow \underline{Q} + \delta \underline{Q}$ mit

$$\delta \underline{Q} = \frac{m_i}{M} \underline{e}_a \cdot \Delta$$

- b) der inneren Koordinaten : $q_j \rightarrow q_j + \delta q_j$,

wobei wir für δq_j schreiben können :

$$\delta q_j = F_{a,j}^i(q) \cdot \Delta$$

In der Bezeichnung ist angedeutet, daß der Koeffizient $F_{a,j}^i$ nur von den inneren Koordinaten q abhängt. Die betrachtete Verschiebung geschah nämlich in Richtung einer körperfesten Achse, ist also unabhängig von der Orientierung im Raum.

- c) der Orientierung des inneren Bezugssystems gegenüber dem raumfesten Koordinatensystem : $\underline{\Omega} \rightarrow \underline{\Omega} + \delta \underline{\Omega}$

Diese wird durch einen infinitesimalen Drehvektor $\delta \underline{\Phi}$ dargestellt. Wir zerlegen diesen Vektor gemäß

$$\delta \underline{\Phi} = \delta \Phi_b \cdot \underline{e}_b$$

in seine Komponenten bezüglich des körperfesten Systems und können dann schreiben :

$$\delta \Phi_b = B_{ab}^i(q) \cdot \Delta$$

Aus demselben Grund wie unter b) sind die Koeffizienten B_{ab}^i nur von q abhängig.

Die Zusammenfassung all dieser Koordinatenänderungen ergibt (unter Weglassung des gemeinsamen Faktors Δ) :

$$\underline{e}_a \cdot \underline{p}_i = \frac{m_i}{M} \underline{e}_a \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \underline{Q}} + F_{a,j}^i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j} + B_{ab}^i \cdot \underline{J}_b \quad (A,6)$$

Daraus erhalten wir schließlich die gewünschte Darstellung des Impulses $\underline{p}_i$, wobei wir noch die Bezeichnung $\underline{P} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \underline{Q}}$ für den Gesamtimpuls verwenden :

$$p_i = \frac{m_i}{M} \underline{P} + \underline{e}_a F_{a,j}^i \frac{\partial}{\partial q_j} + \underline{e}_a B_{ab}^i \cdot \underline{F}_b \quad (A,7)$$

Die Größen $F_{a,j}^i$ bzw. B_{ab}^i werden Mitführungskoeffizienten genannt [45]. Sie hängen natürlich außer von der Wahl der inneren Koordinaten entscheidend ab von der Definition des körperfesten Koordinatensystems.

Man entnimmt direkt aus der Definition der $F_{a,j}^i$:

$$F_{a,j}^i = \underline{e}_a \frac{\partial q_j}{\partial x_i} \quad (A,8)$$

Aus der Definition der B_{ab}^i über die obige infinitesimale Drehung ergibt sich :

$$\delta \underline{e}_c = \delta \underline{\Phi} \times \underline{e}_c = \delta \underline{\Phi}_b \varepsilon_{bcf} \underline{e}_f = \Delta \cdot B_{ab}^i \varepsilon_{bcf} \underline{e}_f$$

und

$$\delta \underline{e}_c = \Delta \cdot \left(\underline{e}_a \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \underline{e}_c$$

Daraus erhalten wir

$$B_{ab}^i \varepsilon_{bcf} = e_{a\mu} \frac{\partial \underline{e}_c}{\partial x_{i\mu}} \cdot \underline{e}_f \quad (A,9)$$

oder durch Auflösung nach B_{ab}^i

$$B_{ab}^i = \frac{1}{2} \varepsilon_{bcf} e_{a\mu} \frac{\partial \underline{e}_c}{\partial x_{i\mu}} \cdot \underline{e}_f \quad (A,10)$$

Wenn man also die inneren Koordinaten q_j und die körperfesten Einheitsvektoren $\underline{e}_a$ als Funktionen der kartesischen Koordinaten x gegeben hat, lassen sich über (A,8) und (A,10) die Mitführungskoeffizienten berechnen.

Für die weitere Behandlung benötigen wir noch die Relationen

$$\sum_i F_{a,j}^i = 0 \quad ; \quad \sum_i B_{ab}^i = 0 \quad , \quad (A,11)$$

die aus der Tatsache folgen, daß bei einer Gesamttranslation sich weder die inneren Koordinaten noch die Euler-schen Winkel ändern.

3. Transformation des Hamiltonoperators

Mit Hilfe des Ausdrucks (A,7) für den Linearimpuls eines Teilchens läßt sich jetzt die kinetische Energie (A,4) auf die neuen Koordinaten umrechnen. Dabei sorgen die Beziehungen (A,11) gerade dafür, daß die Kopplungsglieder zwischen den Schwerpunktskoordinaten und den anderen Koordinaten entfallen. Wir erhalten also eine Aufspaltung in Schwerpunkts- und Relativanteil :

$$T_{\text{ges}} = \frac{1}{2M} P^2 + T_{\text{rel}} \quad (\text{A},12)$$

Im folgenden betrachten wir nur noch den zweiten Anteil der Relativbewegung.

Der Hamiltonoperator H der Relativbewegung

$$H = T_{\text{rel}} + V_{\text{ww}} \quad (\text{A},13)$$

läßt sich dann in der folgenden Form schreiben :

$$H = H_0 + \mathcal{A}_a \mathcal{J}_a + \frac{1}{2} \Theta_{ab}^{-1} \mathcal{J}_a \mathcal{J}_b \quad (\text{A},14)$$

Dabei hängen die Operatoren H_0 , $\mathcal{A}_a$ und Θ_{ab}^{-1} nur noch von den inneren Koordinaten q ab.

Die Ausrechnung liefert :

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2} M_{i\ell}^{-1}(q) \frac{\partial^2}{\partial q_i \partial q_\ell} - \frac{\hbar^2}{2} N_j(q) \frac{\partial}{\partial q_j} + V_{\text{ww}}(q) \quad (\text{A},15a)$$

$$\mathcal{A}_a = \frac{\hbar}{2i} \left(A_{j,a}(q) \frac{\partial}{\partial q_j} + G_a(q) \right) \quad (\text{A},15b)$$

$$\Theta_{ab}^{-1} = \Theta_{ab}^{-1}(q) \quad (\text{A},15c)$$

Dabei haben wir die folgenden Abkürzungen verwendet :

$$M_{jl}^{-1} = \frac{1}{m_i} F_{a,j}^i F_{a,l}^i ; N_j = \frac{1}{m_i} \left(F_{a,l}^i \frac{\partial F_{a,j}^i}{\partial q_l} + \varepsilon_{abc} B_{ab}^i F_{c,j}^i \right) \quad (\text{A}, 16a)$$

$$A_{j,a} = \frac{2}{m_i} F_{b,j}^i B_{ba}^i , G_a = \frac{1}{m_i} \left(F_{b,j}^i \frac{\partial B_{ba}^i}{\partial q_j} + \varepsilon_{bca} B_{bc}^i B_{ca}^i \right) \quad (\text{A}, 16b)$$

$$\Theta_{ab}^{-1} = \frac{1}{m_i} B_{ca}^i B_{cb}^i \quad (\text{A}, 16c)$$

Ein anderer Weg, zum quantenmechanischen Hamiltonoperator zu kommen, besteht in der Anwendung der Schrödingerschen Übersetzungsvorschrift [48] auf die entsprechende klassische Hamiltonfunktion. Wenn man diesen Weg verfolgt, findet man für unsere eben eingeführten Größen N_j und G_a Ausdrücke der Form

$$N_j = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_l} \left(\sqrt{g} M_{jl}^{-1} \right) \quad (\text{A}, 17a)$$

$$G_a = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_j} \left(\sqrt{g} A_{j,a} \right) \quad (\text{A}, 17b)$$

Darin bedeutet $\sqrt{g}$ die nur von den inneren Koordinaten q abhängige Funktionaldeterminante, mit der sich das Volumenelement in dem verwendeten Variablensystem als

$$d\tau = d^3Q \cdot d\Omega \cdot d\tau_q$$

mit

$$d\Omega = \sin\beta \, d\alpha \, d\beta \, d\gamma \quad (\text{A}, 18a)$$

$$d\tau_q = \sqrt{g} \, dq_1 \dots dq_{3N-6} \quad (\text{A}, 18b)$$

schreiben läßt.

In Anhang D.III ist gezeigt, daß sich die Darstellung (A,17) für N_j und G_a , von der wir später noch Gebrauch machen werden, auch unmittelbar aus der Hermitizität der Operatoren H_0 und A_a ableiten läßt.

4. Struktur der Eigenfunktionen

Nachdem der Hamiltonoperator in die Form (A,14) gebracht wurde, die der Beschreibung von kollektiven Rotationen in hohem Maße angepaßt ist, lassen sich die zugehörigen Eigenfunktionen in den verwendeten Variablen q und Ω ausdrücken. Dazu bemerken wir, daß die Drehimpulserhaltung uns erlaubt, die Eigenwerte von J^2 , nämlich $J(J+1)$, und von J_z , nämlich M , als gute Quantenzahlen zu wählen.

Die Eigenfunktionen von H können wir somit schreiben als

$$\psi^{JM} = \psi^{JM}(q, \Omega) = \sum_K \Phi_K^J(q) |JMK\rangle_\Omega \quad (A,19)$$

Dabei bilden die normierten Kreiseigenfunktionen

$$|JMK\rangle_\Omega = \sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} D_{MK}^{J*}(-\Omega) \quad (A,20)$$

(im Unterraum zu festem J und M) ein vollständiges Funktionensystem in den Eulerschen Winkeln (zu den Eigenschaften vgl. Anhang D.II).

Die Abhängigkeit der Wellenfunktion (A,19) von den inneren Koordinaten drückt sich durch die $2J+1$ "inneren Funktionen"

$$\Phi_K^J(q) \quad (K = -J, \dots, +J)$$

aus, die natürlich ganz wesentlich von der Wahl des körperfesten Systems abhängen.

Da die Kreiselfunktionen bekannt sind, läßt sich die Eigenwertgleichung für H allein für die inneren Funktionen $\Phi_K^{\vec{J}}$ formulieren, und zwar in folgender Form :

$$(H^{\vec{J}})_{KK'} \Phi_K^{\vec{J}} = E_{\vec{J}} \Phi_K^{\vec{J}} \quad (A,21)$$

mit dem in inneren Koordinaten gegebenen "Matrixoperator"

$$(H^{\vec{J}})_{KK'} = H_0 \cdot \delta_{KK'} + A_a \langle \vec{J}K | \vec{J}_a | \vec{J}K' \rangle + \frac{1}{2} \Theta_{ab}^{-1} \langle \vec{J}K | \vec{J}_a \vec{J}_b | \vec{J}K' \rangle \quad (A,22)$$

Die Matrixelemente

$$\langle \vec{J}K | \vec{J}_a | \vec{J}K' \rangle = \langle \vec{J}MK | \vec{J}_a | \vec{J}MK' \rangle$$

der körperfesten Drehimpulskomponenten sind dabei wohl- bekannte, M-unabhängige Zahlenwerte (s. Anhang D.II).

Bei vorgegebenem J führt so die Lösung der Eigenwertgleichung (A,21) zu dem Spektrum aller Zustände mit dem Drehimpuls J ; insbesondere erhält man die (J=0)-Zustände als Eigenzustände des Operators H_0 .

Die vorstehenden Diskussionen bezogen sich alle auf ein beliebiges, fest vorgegebenes körperfestes Koordinatensystem. Da sich für die Beschreibung von kollektiven Rotationen die "optimale" Wahl des inneren Bezugssystems als entscheidend erweist, wird im nächsten Abschnitt untersucht, welche Auswirkungen eine Veränderung der Definition des körperfesten Systems mit sich bringt.

II. Veränderung des körperfesten Koordinatensystems

Wenn wir die Definition des körperfesten Bezugssystems ändern wollen, so geschieht dies dadurch, daß wir ein neues inneres Achsenkreuz einführen, das gegenüber dem vorherigen verdreht sein soll. Diese Verdrehung kann nur abhängen von der jeweiligen inneren Struktur der Punkt-konfiguration, also allein von den inneren Koordinaten und läßt sich beschreiben durch eine orthogonale Drehmatrix $t_{ba}(q)$. Es gilt also für die neuen körperfesten Einheitsvektoren, die wir mit $\tilde{e}_a$ bezeichnen:

$$\tilde{e}_a = t_{ba}(q) e_b \quad (A,23)$$

Die inneren Koordinaten q behalten wir bei, d.h. wir machen eine Koordinatentransformation der Form

$$(q, \Omega) \longrightarrow (\tilde{q}, \tilde{\Omega}) \quad \text{mit} \quad (A,24)$$

$$\tilde{q}_j = q_j \quad \text{und} \quad \tilde{\Omega} = t(q) \cdot \Omega$$

1. Transformation der elementaren Impulse

Der Hamiltonoperator (A,14,15) enthält als elementare Impulse die Operatoren $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j}$ und die körperfesten Drehimpulskomponenten J_a , die wir beide der Koordinatentransformation (A,24) unterwerfen müssen.

Dabei lassen sich die Drehimpulskomponenten recht einfach umrechnen. Es gilt:

$$J_a = e_a \cdot \underline{J} = t_{ab}(q) \tilde{e}_b \cdot \underline{J} = t_{ab}(q) \tilde{J}_b \quad ,$$

also

$$J_a = t_{ab}(\tilde{q}) \tilde{J}_b \quad (A,25)$$

Bei der Umrechnung der Impulse $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j}$ benutzen wir wieder die Eigenschaft der Impulse als Erzeugende von infini-

tesimalen Koordinatentransformationen :

Wir machen die infinitesimale Transformation

$$q_j \longrightarrow q_j + \Delta \quad (\text{für ein festes } j)$$

Dann ergeben sich in den neuen Koordinaten $\tilde{q}$ und $\tilde{\Omega}$ die folgenden Veränderungen :

- a) $\tilde{q}_j \longrightarrow \tilde{q}_j + \Delta$
 b) $\tilde{\Omega} \longrightarrow \tilde{\Omega} + \delta \tilde{\Omega}$, also eine infinitesimale Drehung, dargestellt durch den Drehvektor

$$\delta \tilde{\Phi} = \delta \tilde{\Phi}_b \tilde{e}_b \quad ;$$

$$\text{d.h. es gilt} \quad \delta \tilde{e}_a = (\delta \tilde{\Phi}_b \tilde{e}_b) \times \tilde{e}_a = \delta \tilde{\Phi}_b \epsilon_{bac} \tilde{e}_c$$

und andererseits nach Definition (A,23)

$$\delta \tilde{e}_a = \Delta \cdot \frac{\partial t_{ba}}{\partial q_j} \tilde{e}_b = \Delta \frac{\partial t_{ba}}{\partial q_j} t_{bc} \tilde{e}_c \quad .$$

Gleichsetzung ergibt schließlich :

$$\delta \tilde{\Phi}_b = \Delta \cdot T_{b,j}$$

mit der Abkürzung

$$T_{b,j} = \frac{1}{2} \epsilon_{bac} \frac{\partial t_{fa}}{\partial q_j} t_{fc} \quad (A,26)$$

Somit können wir schreiben :

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_j} + T_{b,j}(\tilde{q}) \cdot \tilde{F}_b \quad (A,27)$$

Das Zusatzglied proportional zum Drehimpuls tritt hier auf, weil wir eine q -abhängige Verdrehung des körperfesten Systems vorgenommen haben. Bei einer Verdrehung um konstante Winkel würde es entfallen, wie aus (A,26) zu ersehen ist.

2. Transformation des Hamiltonoperators

Das Einsetzen der Transformationsformeln (A,25) und (A,27) in den Hamiltonoperator (A,14,15) ergibt nun durch elementare Umrechnung die gleiche Struktur wie vorher (wie es natürlich sein muß) :

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{\hbar^2}{2} \tilde{M}_{j\ell}^{-1} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{q}_j \partial \tilde{q}_\ell} - \frac{\hbar^2}{2} \tilde{N}_j \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_j} + V_{ww}(\tilde{q}) \\
 & + \frac{\hbar}{2i} (\tilde{A}_{j,a} \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_j} + \tilde{G}_a) \tilde{F}_a \\
 & + \frac{1}{2} \tilde{\Theta}_{ab}^{-1} \tilde{F}_a \tilde{F}_b
 \end{aligned} \tag{A,28}$$

Dabei errechnen sich die Koeffizienten mit " $\sim$ " (als Funktionen von $\tilde{q} = q$) in folgender Weise aus den vorherigen :

$$\tilde{M}_{j\ell}^{-1} = M_{j\ell}^{-1} \quad ; \quad \tilde{N}_j = N_j \tag{A,29a}$$

$$\tilde{A}_{j,a} = A_{j,b} t_{ba} + 2 M_{j\ell}^{-1} T_{a,\ell} \tag{A,29b}$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{G}_a = & G_b t_{ba} + \frac{i}{2} A_{j,b} \varepsilon_{acf} t_{bc} T_{f,j} + \\
 & + N_j T_{a,j} + M_{j\ell}^{-1} \frac{\partial T_{a,\ell}}{\partial q_j}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{\Theta}_{ab}^{-1} = & \Theta_{cf}^{-1} t_{ca} t_{fb} + \frac{i}{2} A_{j,c} t_{ca} T_{b,j} + \\
 & + \frac{1}{2} A_{j,c} t_{cb} T_{a,j} + M_{j\ell}^{-1} T_{a,j} T_{b,\ell}
 \end{aligned} \tag{A,29c}$$

Man erkennt aus diesen Transformationsformeln, daß der Anteil H_0 von H invariant bleibt. Dies ist sofort einsichtig, weil dieser Teil des Hamiltonoperators die vom körperfesten Koordinatensystem unabhängigen ($J=0$)-Zustände liefert.

Die Aufteilung der restlichen Anteile in

$$H_c = \mathcal{A}_a J_a \quad \text{und} \quad H_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \Theta_{ab}^{-1} J_a J_b$$

verändert sich jedoch bei einer Umdenition des körperfesten Koordinatensystems.

3. Transformation der Wellenfunktionen

Die Frage, in welcher Weise sich bei der hier betrachteten Transformation die Wellenfunktionen (A,19) verändern, läßt sich einfach beantworten.

Durch Einsetzen von $q = \tilde{q}$ und $\tilde{\Omega} = t^{-1}(q) \circ \tilde{\Omega}$ erhalten wir :

$$\tilde{\Psi}^{\mathcal{M}}(\tilde{q}, \tilde{\Omega}) = \sum_{K, K'} \Phi_K^{\mathcal{M}}(\tilde{q}) | \mathcal{M} K \rangle_{\tilde{\Omega}} D_{KK'}^{\mathcal{M}}(t(\tilde{q}))$$

Der Vergleich mit

$$\tilde{\Psi}^{\mathcal{M}} = \sum_K \tilde{\Phi}_K^{\mathcal{M}}(\tilde{q}) | \mathcal{M} K \rangle_{\tilde{\Omega}} \quad (\text{A, 30})$$

ergibt die Transformationsformel für die inneren Funktionen :

$$\tilde{\Phi}_K^{\mathcal{M}} = \sum_{K'} \Phi_{K'}^{\mathcal{M}} \cdot D_{K'K}^{\mathcal{M}}(t) \quad (\text{A, 31})$$

Dabei wurde die Gruppeneigenschaft der Kreiselfunktionen (s. Anhang D.II) benutzt. Man erhält also das erwartete Ergebnis, daß sich das Funktionensystem der $\Phi_K^{\mathcal{M}}$ wie ein sphärischer Tensor der Stufe J verhält.

Die Abhängigkeit der Wellenfunktionen und insbesondere der Aufteilung von H in Kopplungs- und Rotationsterm von der Definition des inneren Bezugssystems kann man nun dazu verwenden, die kollektiven Rotationen möglichst gut von der inneren Bewegung zu entkoppeln. Diese Aufgabenstellung, die zur Wahl eines optimalen körperfesten Systems führt, soll uns im nächsten Abschnitt beschäftigen.

III. Beschreibung der kollektiven Rotationen

Die anschauliche Vorstellung, die wir mit dem Begriff der kollektiven Rotationen verbinden, ist die, daß sich während der Rotation (bei variablem Drehimpuls J) die innere Bewegung nur wenig verändert. Dies läßt sich folgendermaßen formulieren :

Die Wellenfunktion des Ausgangszustandes mit $J = 0$ (wir betrachten im weiteren stets Systeme mit nicht-entartetem Ausgangszustand, meistens also mit nichtentartetem Grundzustand) sei

$$\Psi_0 = \Psi_0(q)$$

Auf Grund der Nichtentartung kann sie stets reell gewählt werden.

Für die Anregungszustände der betrachteten Rotationsbande würde man dann Wellenfunktionen der Form

$$\Psi^{JM}(q, \Omega) = \Psi_0(q) \cdot \sum_K c_K^J |JMK\rangle_\Omega \quad (A, 32)$$

erwarten.

Der Rotationsanteil $\sum_K c_K^J |JMK\rangle_\Omega$ entspricht der Wellenfunktion eines i.a. asymmetrischen Kreisels.

Man sieht, daß die angegebene Form der Wellenfunktionen für $J \neq 0$ nur für eine bestimmte Wahl des körperfesten Systems zu realisieren ist; denn eine q -abhängige Umdefinition dieses Systems würde die Entkopplungsstruktur (A,32) zerstören, weil dann unter der Summe eine q -Abhängigkeit auftreten würde.

Wir zeigen im ersten Punkt dieses Abschnitts im Rahmen einer Störungsrechnung nach dem Drehimpuls $\underline{J}$, wie der Ansatz (A,32) mit der richtigen Wahl des körperfesten Systems, der sog. spezifischen Entkopplung verknüpft ist (vgl. Ruder und Volz [44]). Im zweiten Punkt untersuchen wir den genaueren Zusammenhang der spezifischen Entkopplung mit dem dazu äquivalenten Extremalprinzip.

1. Störungsrechnung nach J und spezifische Entkopplung

Die Zerlegung des Hamiltonoperators in der Form (A,14)

$$H = H_0 + \mathcal{A}_a \mathcal{F}_a + \frac{1}{2} \Theta_{ab}^{-1} \mathcal{F}_a \mathcal{F}_b$$

legt es nahe, ausgehend vom (J=0)-Grundzustand Ψ_0 eine Störungsrechnung nach $\underline{J}$ zu machen. Dies führt zu den folgenden Ergebnissen (s. Ruder [45]) :

- a) Die Störungsenergie 1. Ordnung $\mathcal{E}_J^{(1)}$ verschwindet. Dies liegt daran, daß für die Erwartungswerte der Operatoren $\mathcal{A}_a$ gilt :

$$\langle \Psi_0 | \mathcal{A}_a | \Psi_0 \rangle = \langle 0 | \mathcal{A}_a | 0 \rangle = 0 , \quad (A,33)$$

was auf die Hermitizität von $\mathcal{A}_a$ und den Vorzeichenwechsel von $\mathcal{A}_a$ bei Zeitumkehr (komplexe Konjugation) zurückzuführen ist. Anschaulich heißt das, daß die Rotationsenergie nicht von der Drehrichtung abhängen kann.

- b) Die Wellenfunktion schreibt sich bis zur 1. Ordnung

$$\Psi^{JM} \approx \Psi_0(q) \sum_K c_K^{J(0)} |JMK\rangle_\Omega + \sum_{n \neq 0, K} c_{Kn}^{J(1)} \Psi_n(q) |JMK\rangle_\Omega$$

mit

$$c_{Kn}^{J(1)} = \frac{\langle n | \mathcal{A}_a | 0 \rangle}{E_0 - E_n} \langle JK | \mathcal{F}_a | JK' \rangle c_{K'}^{J(0)} \quad (A,34)$$

Dabei sind $\Psi_n(q) \equiv |n\rangle$ die Eigenfunktionen von H_0 mit den Energien E_n , also (für $n \neq 0$) die angeregten Zustände von H für $J = 0$.

Um die oben heuristisch vermutete Separation zwischen innerer Bewegung und Rotation zu erhalten, sollten die Koeffizienten 1. Ordnung $c_{Kn}^{J(1)}$ verschwinden. Aus deren Gestalt erkennt man, daß dies zu erreichen ist, wenn alle Matrixelemente $\langle n | \mathcal{A}_a | 0 \rangle$ zu Null werden. Diese Bedin-

gung wäre erfüllt, wenn $\mathcal{A}_a \equiv 0$ gelten würde. Das identische Verschwinden der Kopplungsglieder läßt sich aber nicht erreichen, wie von mehreren Autoren (vgl. z.B. [49]) gezeigt wurde. Es reicht jedoch aus, eine schwächere Forderung zu erfüllen, nämlich

$$\mathcal{A}_a \Psi_0 = 0, \quad (A, 35)$$

die sog. Gleichungen der spezifischen Entkopplung [44]. Bei vorgegebener Wellenfunktion Ψ_0 sind die Gleichungen (A, 35) die Bestimmungsgleichungen für das optimale körperfeste Koordinatensystem. Die Form (A, 32) für die Wellenfunktionen der kollektiven Rotationsbande auf Ψ_0 ist somit bei spezifischer Entkopplung richtig bis zur 2. Ordnung der Störungsrechnung nach J.

c) Bei spezifischer Entkopplung errechnen sich die Anregungsenergien ϵ_3 als die Energien eines asymmetrischen Kreisel mit dem Trägheitstensor

$$(\Theta_{ab}^{-1})_{ab} = \langle \Psi_0 | \Theta_{ab}^{-1} | \Psi_0 \rangle \quad (A, 36)$$

Die Koeffizienten $c_K^{J(0)}$ müssen also bestimmt werden aus der Eigenwertgleichung

$$\frac{1}{2} \langle 0 | \Theta_{ab}^{-1} | 0 \rangle \langle JK | \hat{J}_a \hat{J}_b | JK' \rangle c_{K'}^{J(0)} = \epsilon_3 \cdot c_K^{J(0)} \quad (A, 37)$$

Die Voraussetzung für die Anwendbarkeit der skizzierten Störungsrechnung ist natürlich, daß die Rotationsenergien ϵ_3 klein gegenüber den inneren Anregungsenergien von H_0 , also den Energiedifferenzen $E_n - E_0$ sind. Dies ist, wie sich experimentell zeigt, bei den nicht zu schwach deformierten Kernen recht gut erfüllt. Falls diese Voraussetzung nicht erfüllt ist, ist es häufig nicht mehr sinnvoll, von kollektiven Rotationen zu sprechen, da sich dann die innere Struktur des Grundzustands beim Übergang zu einem "Rotationszustand" stark ändert.

Die im allgemeinen recht komplizierte Struktur der spezifischen Entkopplungsgleichungen wollen wir hier noch etwas verdeutlichen. Wir denken uns ein vorläufiges körperfestes System als gegeben; die zugehörigen Mitführungskoeffizienten nach (A,8) und (A,10) sowie alle daraus berechneten Größen werden mit dem oberen Index ^(o) bezeichnet. Die Drehmatrix $t_{ba}(q)$ nach Abschnitt A.II führe nun auf das gesuchte optimale System über :

$$\underline{e}_a = t_{ba} \underline{e}_b^{(o)}$$

Dann lassen sich die Gleichungen der spezifischen Entkopplung (A,35) (bei Berücksichtigung von (A,17)) folgendermaßen schreiben :

$$\frac{1}{V_g} \frac{\partial}{\partial q_j} \left[V_g \left(M_{j\ell}^{(o)} T_{a,\ell} + \frac{1}{2} A_{j,b}^{(o)} t_{ba} \right) \Psi_o^2 \right] = 0 \quad (A,38)$$

Man erkennt mit Hilfe von (A,26), daß es sich um ein partielles (nichtlineares) Differentialgleichungssystem 2. Ordnung für die Drehmatrix $t_{ba}(q)$ oder die dazu äquivalenten 3 inneren Eulerschen Winkel $(\alpha, \beta, \gamma)(q)$ handelt.

Im nächsten Punkt wird die Bedeutung des Extremalprinzips diskutiert, das zu den Gleichungen der spezifischen Entkopplung äquivalent ist und sie daher ersetzen kann.

2. Äquivalentes Extremalprinzip

Ein weiterer Zugang zur spezifischen Entkopplung geschieht über das folgende Variationsproblem (vgl. [44,45]):

Man betrachte die von der spezifischen Entkopplung her nahegelegten Wellenfunktionen

$$\Psi^{\mathfrak{M}} = \Psi_0(q) \cdot \sum_K c_K^{\mathfrak{J}} |\mathfrak{M}K\rangle_{\Omega}$$

als einen Variationsansatz zur Bestimmung von $\Omega = \Omega(x)$, d.h. bei vorgegebenem Grundzustand $\Psi_0 = \Psi_0(q)$ variere man die Definition des körperfesten Systems so, daß der Erwartungswert von H mit der angegebenen Wellenfunktion minimal wird. Dabei ändert sich einerseits die Zerlegung (A,14) von H, andererseits auch das System der Koeffizienten $c_K^{\mathfrak{J}}$.

Man bildet also

$$\langle \Psi^{\mathfrak{M}} | H | \Psi^{\mathfrak{M}} \rangle$$

und erhält (mit Hilfe von $\langle \Psi_0 | \mathcal{A}_a | \Psi_0 \rangle = 0$) :

$$\begin{aligned} \langle \Psi^{\mathfrak{M}} | H | \Psi^{\mathfrak{M}} \rangle &= \\ &= E_0 + \frac{1}{2} \langle \Psi_0 | \Theta_{ab}^{-1} | \Psi_0 \rangle \langle \mathfrak{J}K | \mathfrak{J}_a \mathfrak{J}_b | \mathfrak{J}K' \rangle c_K^{\mathfrak{J}*} c_{K'}^{\mathfrak{J}} = \text{Extr.}! \end{aligned} \quad (\text{A,39})$$

Wir untersuchen zuerst die Variation des Tensors $\langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle = \langle \Psi_0 | \Theta_{ab}^{-1} | \Psi_0 \rangle$, der in (A,39) vorkommt.

a) Variation des Trägheitstensors $\langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle$

Für die Variation des körperfesten Systems spezialisieren wir die allgemeinen Transformationsformeln aus Abschnitt A.II auf infinitesimale Änderungen. Eine infinitesimale Drehung der körperfesten Achsenvektoren läßt sich in der Form schreiben :

$$\delta \underline{e}_a = \delta \underline{\Phi} \times \underline{e}_a = \delta \underline{\Phi}_c \underline{e}_c \times \underline{e}_a = \delta \underline{\Phi}_c \varepsilon_{cab} \underline{e}_b$$

Dabei sind

$$\delta \underline{\Phi}_c = \delta \bar{\Phi}_c(q) \quad (c = 1, 2, 3) \quad (A, 40)$$

als Komponenten des infinitesimalen Drehvektors beliebige Funktionen von q .

Der Vergleich mit (A, 23) ergibt für die Drehmatrix bekanntlich :

$$t_{ba}(q) = \delta_{ab} + \varepsilon_{cab} \delta \bar{\Phi}_c(q) \quad (A, 41)$$

Daraus können wir die Größen $T_{b,j}(q)$ nach (A, 26) errechnen und erhalten dann in der benötigten Entwicklung bis zur 1. Ordnung :

$$T_{b,j}(q) = \frac{\partial(\delta \bar{\Phi}_c)}{\partial q_j} \quad (A, 42)$$

Mit den beiden Formeln (A, 41) und (A, 42) gehen wir in die Transformationsformel (A, 29c) ein und erhalten schließlich (in 1. Ordnung) :

$$\begin{aligned} \delta \Theta_{ab}^{-1} &= \Theta_{fb}^{-1} \varepsilon_{caf} \delta \bar{\Phi}_c + \Theta_{af}^{-1} \varepsilon_{cbf} \delta \bar{\Phi}_c \\ &+ \frac{1}{2} A_{j,a} \frac{\partial(\delta \bar{\Phi}_b)}{\partial q_j} + \frac{1}{2} A_{j,b} \frac{\partial(\delta \bar{\Phi}_a)}{\partial q_j} \end{aligned} \quad (A, 43)$$

Die ersten beiden Terme entstehen auf Grund der Tensoreigenschaft von Θ_{ab}^{-1} , sie treten auch auf, wenn die Funktionen $\delta \bar{\Phi}_c$ unabhängig von q sind, während die beiden letzten Terme auf die q -Abhängigkeit der Drehung zurückzuführen sind.

Die Variation des Erwartungswertes von $\Theta_{ab}^{-1}(q)$ läßt sich dann aus

$$\delta \langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle = \int dq \sqrt{g} \Psi_0^2 \cdot \delta \Theta_{ab}^{-1}$$

mit Hilfe von partieller Integration der zwei letzten Terme in (A,43) folgendermaßen errechnen :

$$\begin{aligned}
 \delta \langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle &= \int dq \sqrt{g} \Psi_0 \cdot \delta \Phi_c \left[\epsilon_{caf} \Theta_{fb}^{-1} + \epsilon_{cbf} \Theta_{af}^{-1} - \right. \\
 &\quad - \delta_{bc} \left\{ A_{j,a} \frac{\partial}{\partial q_j} + \frac{1}{2\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_j} (\sqrt{g} A_{j,a}) \right\} - \\
 &\quad \left. - \delta_{ac} \left\{ A_{j,b} \frac{\partial}{\partial q_j} + \frac{1}{2\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_j} (\sqrt{g} A_{j,b}) \right\} \right] \Psi_0 \\
 &= \int dq \sqrt{g} \Psi_0 \cdot \delta \Phi_c \left[\epsilon_{caf} \Theta_{fb}^{-1} + \epsilon_{cbf} \Theta_{af}^{-1} - \right. \quad (A,44) \\
 &\quad \left. - \frac{2i}{\hbar} (\delta_{bc} \mathcal{A}_a + \delta_{ac} \mathcal{A}_b) \right] \Psi_0
 \end{aligned}$$

Die weitere Behandlung hängt nun davon ab, wie man den Umstand verarbeitet, daß die Eigenwertgleichung (A,37), also das Diagonalisierungsproblem des asymmetrischen Kreisels (für festes J) im allgemeinen (2J+1) verschiedene Rotationsenergien, d.h. ein ganzes Rotationsmultipllett liefert.

b) Extremalprinzip für das gesamte Rotationsmultipllett

Bei Betrachtung von (A,44) erkennt man, daß die beiden ersten Terme in (A,44) verschwinden, wenn man die Spur des angegebenen Tensors bildet.

Wir erhalten also :

$$\delta \langle S_p \Theta^{-1} \rangle = \delta \langle \Theta_{aa}^{-1} \rangle = \int dq \sqrt{g} \Psi_0 \cdot \delta \Phi_c \cdot \left(-\frac{4i}{\hbar} \right) \mathcal{A}_c \Psi_0 \quad (A,45)$$

Stellen wir jetzt die Forderung, die Spur des Trägheitstensors $\langle \Theta_{aa}^{-1} \rangle$ zu minimalisieren, so ergibt sich, da

die $\delta\tilde{\Phi}_c(q)$ beliebige Funktionen von q sind :

$$A_c \psi_0 = 0 \quad (c = 1, 2, 3)$$

Dies sind genau die Gleichungen der spezifischen Entkopplung nach (A,35).

Die physikalische Bedeutung der Spurbildung erhält man aus der folgenden Überlegung :

Wie bereits erwähnt, liefert das Diagonalisierungsproblem des asymmetrischen Kreisels $(2J+1)$ verschiedene Energien $\epsilon_J^{(\tau)}$ ($\tau = 1, \dots, 2J+1$) mit den zugehörigen Eigenvektoren $c_K^{J(\tau)}$.

Die Summe all dieser Energien stimmt überein mit der Spur der zu diagonalisierenden Matrix, läßt sich somit schreiben als

$$\sum_{\tau} \epsilon_J^{(\tau)} = \sum_K \frac{1}{2} \langle \psi_0 | \Theta'_{ab} | \psi_0 \rangle \langle JK | J_a J_b | JK \rangle \quad (A,46)$$

Unter Berücksichtigung von

$$\sum_K \langle JK | J_a J_b | JK \rangle = \frac{1}{3} \hbar^2 J(J+1)(2J+1) \delta_{ab}$$

(s. Anhang D.II) können wir also sagen, daß der Schwerpunkt des vollständigen Rotationsmultipletts bei der Energie

$$\overline{\epsilon_J} = \frac{1}{2J+1} \sum_{\tau} \epsilon_J^{(\tau)} = \frac{\hbar^2}{2} J(J+1) \langle \psi_0 | \frac{1}{3} S_p \Theta' | \psi_0 \rangle \quad (A,47)$$

liegt. Stellen wir daher die Forderung, den Schwerpunkt des Rotationsmultipletts in der Energie zu minimalisieren, so ist das, unabhängig vom jeweils betrachteten Drehimpuls, gleichbedeutend mit dem Extremalprinzip

$$\langle \psi_0 | S_p \Theta' | \psi_0 \rangle = \text{Min.}! \quad (A,48)$$

also auch äquivalent zur spezifischen Entkopplung (A,35).

Das körperfeste Koordinatensystem ist dann für sämtliche Rotationsniveaus des entsprechenden asymmetrischen Kreisel s dasselbe.

Diese Überlegungen gelten ganz allgemein. Sie verlieren aber ihren Aussagewert, wenn die Niveaus des Multipletts sehr weit auseinanderliegen. Das sieht man etwa bei der (K=0)-Bande eines gg-Kerns, wo bei festem J nur ein Zustand in der betrachteten Rotationsbande in Erscheinung tritt. Die anderen Zustände des J-Multipletts sind nicht als eigentliche Rotationszustände anzusehen und liegen energetisch wesentlich höher. In diesem Fall ist es nicht sinnvoll, den Schwerpunkt des Rotationsmultipletts zu betrachten. Man will vielmehr für jeden J-Wert nur einen Zustand des entsprechenden Multipletts (etwa für K=0) herausgreifen. Dieser Fall wird im nächsten Punkt behandelt.

c) Extremalprinzip für einen einzelnen Rotationszustand

Wie bereits am Beginn dieses Abschnitts gezeigt wurde, ist die Rotationsenergie für einen bestimmten Rotationszustand, der sich auf Ψ_0 aufbaut, nach (A,39)

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \langle \Psi_0 | \Theta_{ab}^{-1} | \Psi_0 \rangle \langle JK | J_a J_b | JK \rangle c_K^{*} c_K \quad (\text{A,49})$$

Bei der Variation des körperfesten Koordinatensystems ändert sich der Trägheitstensor Θ_{ab}^{-1} , deshalb verändern sich auch die Koeffizienten c_K^J , die als Eigenvektoren der Matrix $\frac{1}{2} \langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle \langle JK | J_a J_b | JK \rangle$ zu bestimmen sind.

Während diese Tatsache im vorhergehenden Punkt nicht einging, ist das jetzt bei der Variation zu berücksichtigen.

Man kann nun leicht einschen (wie in Anhang D.IV gezeigt ist), daß dieses Vorgehen dazu führt, daß man in dem Ausdruck für E_{rot} oder ursprünglich in der Wellen-

funktion (A,32) neben der Variation des körperfesten Systems die Koeffizienten c_K^J als unabhängig variierbare Größen betrachten kann. Wir erhalten also die folgende Vorschrift :

- a) Man variiere die Definition des körperfesten Systems bei festgehaltenen c_K^J , fordere also

$$\frac{1}{2} \delta \langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle \langle JK | J_a J_b | JK' \rangle c_K^{\bar{J}*} c_{K'}^{\bar{J}} = 0 \quad (A,50)$$

- b) Man variiere die Koeffizienten c_K^J bei festgehaltenem körperfesten System, was zur Eigenwertgleichung

$$\frac{1}{2} \langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle \langle JK | J_a J_b | JK' \rangle c_{K'}^{\bar{J}} = \epsilon_{\bar{J}} \cdot c_K^{\bar{J}} \quad (A,51)$$

des asymmetrischen Kreisels führt.

Praktisch wird man dabei etwa so vorgehen : Man gibt sich einen Satz von Koeffizienten c_K^J näherungsweise vor und führt mit diesen die Variation (A,50) zur Bestimmung des körperfesten Systems durch. Mit dem daraus zu errechnenden Wert $\langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle$ des reziproken Trägheitstensors geht man in die Eigenwertgleichung (A,51) ein und erhält so verbesserte Werte der Koeffizienten c_K^J . Wenn dieses Verfahren bei iterativer Fortsetzung konvergiert, gewinnt man schließlich mit den Energien $\epsilon_{\bar{J}}$ die richtigen Rotationsenergien.

Wie man sieht, kann dies zu einem optimalen inneren Koordinatensystem führen, das sich bei wachsendem Drehimpuls möglicherweise ändert. Denn die Variationsgleichung (A,50) zur Bestimmung dieses Systems ist i.a. J -abhängig. In dem wichtigen Spezialfall der $(K=0)$ -Banden eines symmetrischen Kreisels, der im nächsten Abschnitt behandelt wird, ist es jedoch so, daß sich für alle J -Werte dasselbe innere System ergibt.

Wir wollen noch bemerken, daß bei der Bestimmung des optimalen körperfesten Systems eine gewisse (eigentlich erwünschte) Freiheit bleibt. Man kann nämlich stets

das körperfeste System einer konstanten, d.h. konfigurationsunabhängigen Verdrehung unterwerfen. Dies ändert zwar die Komponenten des Trägheitstensors (Transformation wie ein kartesischer Tensor 2. Stufe), aber auch die Koeffizienten c_K^J (Transformation wie ein sphärischer Tensor der Stufe J), so daß die Rotationsenergien unverändert bleiben. So ist es stets möglich, in das System der Hauptachsen des gemittelten Tensors $\langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle$ überzugehen. Diese sind aber deutlich von den Hauptachsen einer einzelnen Punktkonfiguration zu unterscheiden.

3. Spezialisierung auf (K=0)-Banden

Ein wichtiger Spezialfall der obigen allgemeinen Betrachtungen tritt auf, wenn der gemittelte Trägheitstensor $\langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle$ so beschaffen ist, daß ein reziprokes Trägheitsmoment sehr groß, im Grenzfall unendlich wird, während die beiden anderen endlich bleiben. Die dadurch ausgezeichnete zugehörige Hauptachse bezeichnen wir als die 3-Achse. Es gilt also :

$$\langle \Psi_0 | \Theta_{33}^{-1} | \Psi_0 \rangle \rightarrow \infty \quad (A,52)$$

Das Trägheitsmoment um die 3-Achse wird somit Null.

Da die Rotationsenergien aus der Diagonalisierung des Kreisel-Hamiltonoperators (in Hauptachsen)

$$H_{\text{Kreisel}} = \frac{1}{2} \langle \Theta_{11}^{-1} \rangle J_1^2 + \frac{1}{2} \langle \Theta_{22}^{-1} \rangle J_2^2 + \frac{1}{2} \langle \Theta_{33}^{-1} \rangle J_3^2 \quad (A,53)$$

gewonnen werden, sind die einzigen Rotationszustände, deren Energien im Grenzfall (A,52) endlich bleiben, diejenigen mit K=0, also die Zustände

$$\Psi^{JM} = \Psi_0(q) |JM0\rangle_\Omega \quad (A,54)$$

Wir haben damit die (K=0)-Bande eines symmetrischen Kreisels vor uns. Dieser wichtige Grenzfall ist bei den

Grundzustandsbanden deformierter $\beta\beta$ -Kerne in sehr guter Näherung realisiert.

Die Rotationsenergien ε_J lassen sich dann folgendermaßen schreiben :

$$\begin{aligned}\varepsilon_J &= \frac{1}{2} \langle \Psi_0 | \Theta_{ab}^{-1} | \Psi_0 \rangle \langle J0 | J_a J_b | J0 \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} J(J+1) \langle \Psi_0 | \frac{1}{2} (\Theta_{11}^{-1} + \Theta_{22}^{-1}) | \Psi_0 \rangle\end{aligned}\quad (A,55)$$

Dabei haben wir die Drehimpulsmatrixelemente aus Anhang D.II eingesetzt.

Folglich erhalten wir für ($K=0$)-Banden das effektive Trägheitsmoment

$$\Theta_{eff}^{-1} = \frac{1}{2} \langle \Psi_0 | \Theta_{11}^{-1} + \Theta_{22}^{-1} | \Psi_0 \rangle \quad (A,56)$$

Das Extremalprinzip zur Bestimmung des optimalen körperfesten Koordinatensystems lautet hier also :

$$\frac{1}{2} \langle \Psi_0 | \Theta_{11}^{-1} + \Theta_{22}^{-1} | \Psi_0 \rangle = \text{Min.}! \quad (A,57)$$

und ist unabhängig vom Drehimpuls J . Allerdings wird, wie wir gleich sehen werden, dadurch das körperfeste System nicht vollständig bestimmt, sondern nur die körperfeste 3-Achse. Dies ist auch zu erwarten; denn die Wellenfunktion (A,54) enthält die Kreiselfunktion

$$D_{MO}^{J*}(\Omega) = e^{iM\alpha} d_{MO}^J(\beta) \quad , \quad (A,58)$$

die nicht vom Winkel γ abhängt, der die Lage der 1- und 2-Achse bestimmen würde.

Um diese Tatsache auch explizit der Formel (A,56) für Θ_{eff}^{-1} anzusehen, setzen wir die Ausdrücke für die Mitführungskoeffizienten B_{a1}^i und B_{a2}^i , die in Anhang D.V in den Eulerschen Winkeln α, β, γ gegeben sind, ein und erhalten :

$$\Theta_{eff}^{-1} = \int \sum_i \frac{1}{2m_i} [\sin^2 \beta (\nabla_i \alpha)^2 + (\nabla_i \beta)^2] \Psi_o^2(q) \sqrt{g} dq = Min.!$$

(A,59)

Man erkennt, daß nur die Winkel α und β eingehen, die die Lage der körperfesten 3-Achse bestimmen.

Die diesem Extremalprinzip entsprechenden Eulerschen Gleichungen gewinnt man mit Hilfe der Formel (A,44) aus Abschnitt A.III.2.a, was zu folgendem Ergebnis führt :

$$\begin{aligned} (\mathcal{A}_1 - \frac{\hbar}{2i} \Theta_{23}^{-1}) \Psi_o &= 0 \\ (\mathcal{A}_2 + \frac{\hbar}{2i} \Theta_{13}^{-1}) \Psi_o &= 0 \end{aligned}$$

(A,60)

Wir haben hier also nur zwei Gleichungen, entsprechend der Zahl der zu bestimmenden Winkel α und β .

Die Formulierung des Variationsproblems im Fall der (K=0)-Banden führt somit zur Bestimmung der optimalen körperfesten 3-Achse, die allein zur Angabe der Wellenfunktionen ausreicht. In diesem Sinne kann man also bei einer (K=0)-Bande von einem axialsymmetrischen Problem sprechen.

Damit sind die allgemeinen Überlegungen zur Behandlung von kollektiven Rotationen abgeschlossen. Im nächsten Teil soll die Anwendung dieser Methoden auf das Rotor + Particle - Modell behandelt werden. Dies dient auch zur Vorbereitung auf das Hauptproblem, die Rotationsbanden deformierter gg-Kerne, die in Teil C zur Sprache kommen.

Teil B

Anwendung der spezifischen Entkopplung auf das Rotor + Particle - Modell

Die in Teil A angestellten Überlegungen sollen hier angewendet werden auf das Rotor + Particle - Modell, d.h. es werden die kollektiven Rotationen eines Systems, bestehend aus einem Rumpf (Rotor) und einem oder mehreren Außenteilchen, untersucht. Dabei wird uns besonders der Grenzfall mit sehr großem Trägheitsmoment des Rumpfes interessieren.

I. Allgemeine Beschreibung und Störungsrechnung

1. Koordinaten und Hamiltonoperator

Das betrachtete System bestehe aus einem axialsymmetrisch deformierten Rumpf, der nur Rotationsfreiheitsgrade besitzt (deshalb Rotor genannt) und mehreren gleichen Außenteilchen der Masse m .

Mit dem Rumpf verbunden ist ein körperfestes Koordinatensystem, gegeben durch die Eulerschen Winkel $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$, dessen 3-Achse die Symmetrieachse des Rumpfes bildet. Die Außenteilchen werden beschrieben durch Koordinaten x_{ia} ($a = 1, 2, 3$), die auf das körperfeste Rumpfsystem bezogen sind, und bewegen sich in einem am Rumpf hängenden, axialsymmetrisch deformierten Potential. Daneben kann natürlich noch eine Restwechselwirkung zwischen den Teilchen vorhanden sein.

In diesen eben angegebenen Koordinaten schreibt sich der Hamiltonoperator folgendermaßen (vgl. etwa [50]) :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i + V(x) + \sum_a \frac{1}{2\Theta_a} L_{Ra}^2 \quad (B,1)$$

Dabei sind Θ_a ($a = 1, 2, 3$) die Hauptträgheitsmomente des Rumpfes, für die wegen der Axialsymmetrie gilt :

$$\Theta_1 = \Theta_2 =: \Theta_0 \quad (B,2)$$

Die Komponenten L_{Ra} des Rumpfdrehimpulses lassen sich durch den Gesamtdrehimpuls $\underline{J}$ und die Drehimpulse $\underline{j}_i$ der Außenteilchen folgendermaßen ausdrücken :

$$\underline{L}_R = \underline{J} - \sum_i \underline{j}_i = \underline{J} - \underline{j} \quad (B,3)$$

Der Drehimpuls der Außenteilchen wurde dabei mit

$$\underline{j} = \sum_i \underline{j}_i \quad (B,4)$$

bezeichnet.

Somit ergibt sich für den Hamiltonoperator H :

$$\begin{aligned} H = & -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i + V + \frac{1}{2\Theta_0} (j_1^2 + j_2^2) - \\ & - \frac{1}{\Theta_0} (j_1 j_1 + j_2 j_2) + \frac{1}{2\Theta_0} (j_1^2 + j_2^2) + \frac{1}{2\Theta_3} L_{R3}^2 \end{aligned} \quad (B,5)$$

Rotationen des Rumpfes um seine Symmetrieachse werden ausgeschlossen, wenn wir das Trägheitsmoment Θ_3 gegen Null gehen lassen. Damit sind alle zulässigen Wellenfunktionen Eigenfunktionen zu L_{R3} mit dem Eigenwert 0 :

$$L_{R3} \Psi = (j_3 - j_3) \Psi = 0 \quad (B,6)$$

Der letzte Term in (B,5) hat somit keine Bedeutung und kann weggelassen werden.

Der Hamiltonoperator (B,5) hat bereits die Standardform (A,14) der Zerlegung nach Potenzen von $\underline{J}$, wobei für die einzelnen Bestandteile gilt :

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i + V + \frac{1}{2\Theta_0} (j_1^2 + j_2^2) \quad (B,7a)$$

$$H_c = -\frac{1}{\Theta_0} (j_1 J_1 + j_2 J_2) \quad (B,7b)$$

$$H_{\text{rot}} = \frac{1}{2\Theta_0} (J_1^2 + J_2^2) \quad (B,7c)$$

Das hier verwendete, am Rumpf hängende Koordinatensystem ist aber nur als vorläufig zu betrachten. Das optimale Bezugssystem der spezifischen Entkopplung ist, ausgehend von dem gegebenen, erst noch zu finden. Bevor wir uns dieser Frage zuwenden, wollen wir die kollektiven Rotationen mit der Methode der Störungsrechnung nach J (ohne spezifische Entkopplung) behandeln (vgl. [46]).

2. Störungsrechnung nach J

Wir wollen hier nur Rotationsbanden beschreiben, die mit $J = 0$ beginnen. Dann ist die Wellenfunktion des Ausgangszustands

$$\Psi_0 = \Psi_0(x) \quad (B,8)$$

nur von den Koordinaten x abhängig.

Wegen (B,6) gilt :

$$j_3 \Psi_0 = 0 \quad (B,9)$$

Weiter wird vorausgesetzt, daß Ψ_0 als $(K=0)$ -Eigenzustand zu H_0 mit der Energie E_0 nichtentartet ist.

Wir können nun die in Abschnitt A.III.1 skizzierte Störungsrechnung nach J auf das hier gegebene Problem anwenden. Dabei ist zu berücksichtigen, daß, wenn keine spezifische Entkopplung vorliegt, der effektive Trägheitstensor (A,36) etwas modifiziert zu schreiben ist (s. Ruder [45]), nämlich in der Form

$$(\Theta_{\text{eff}}^{-1})_{ab} = \langle 0 | \Theta_{ab}^{-1} | 0 \rangle - 2 \sum_{n \neq 0} \frac{\langle 0 | \mathcal{A}_a | n \rangle \langle n | \mathcal{A}_b | 0 \rangle}{E_n - E_0} \quad (\text{B},10)$$

Die Anwendung dieser Beziehung auf den hier vorliegenden Fall liefert :

$$(\Theta_{\text{eff}}^{-1})_{ab} = \frac{1}{\Theta_0} \delta_{ab} - \frac{2}{\Theta_0^2} \sum_{n \neq 0} \frac{\langle 0 | j_a | n \rangle \langle n | j_b | 0 \rangle}{E_n - E_0} \quad (\text{B},11)$$

für $a, b = 1, 2$.

Die Zustände $|n\rangle$ sind dabei, wie früher, die Eigenzustände von H_0 mit den Energien E_n und haben hier K als gute Quantenzahl (zum Operator j_3).

Man kann nun leicht sehen (s. Anhang D.VI), daß der Tensor (B,11) diagonal ist, d.h.

$$(\Theta_{\text{eff}}^{-1})_{12} = 0 \quad (\text{B},12)$$

und daß gilt :

$$(\Theta_{\text{eff}}^{-1})_{11} = (\Theta_{\text{eff}}^{-1})_{22} = \frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} \quad (\text{B},13)$$

mit

$$\frac{1}{\Theta_{\text{eff}}} = \frac{1}{\Theta_0} - \frac{2}{\Theta_0^2} \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n | j_+ | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0} \quad (\text{B},14)$$

Folglich erhalten wir für die Entwicklungskoeffizienten nullter Ordnung mit Hilfe der Kreiselgleichungen

(s. auch (B,6)) :

$$c_K^{J(0)} = \delta_{K0} \quad (\text{B},15)$$

Die Wellenfunktionen schreiben sich nach (A,34) bis zur 1. Ordnung :

$$\begin{aligned} \Psi^{\mathcal{M}} = & \Psi_0(x) |\mathcal{M}0\rangle_{\Omega} + \frac{\hbar}{2\Theta_0} \sqrt{\mathcal{J}(\mathcal{J}+1)} \cdot \sum_{n \neq 0} \Psi_n(x) \cdot \\ & \left(\frac{\langle n | j_+ | 0 \rangle}{E_n - E_0} |\mathcal{M}1\rangle_{\Omega} + \frac{\langle n | j_- | 0 \rangle}{E_n - E_0} |\mathcal{M}-1\rangle_{\Omega} \right) \end{aligned} \quad (\text{B},16)$$

Dabei wurde der Kopplungsterm H_c nach (B,7b) mit Hilfe der Schrauboperatoren

$$j_{\pm} = j_i \pm i j_j \quad \text{und} \quad \bar{j}_{\pm} = \bar{j}_i \pm i \bar{j}_j$$

in der Form

$$H_c = - \frac{1}{2 \Theta_0} (j_+ j_- + j_- j_+) \quad (B,17)$$

geschrieben und die Matrixelemente von $J_{\pm}$ nach Anhang D.II eingesetzt.

Die Rotationsenergien sind von der Form

$$\varepsilon_j = \frac{\hbar^2}{2 \Theta_{\text{eff}}} j(j+1) \quad (B,18)$$

mit Θ_{eff} aus (B,14). Wir erhalten hier also das Spektrum einer (K=0)-Bande.

Man sieht an dieser Stelle auch, daß die Anwendbarkeit der Störungsrechnung nach J gegeben ist, wenn das Trägheitsmoment Θ_0 des Rumpfes groß ist. Insbesondere würden sich bei Mitnahme höherer Terme als der 2. Ordnung in J erst Korrekturen der Ordnung $(\frac{1}{\Theta_0})^3$ bei der Formel für $\frac{1}{\Theta_{\text{eff}}}$ ergeben.

Betrachtet man die Abhängigkeit der obigen Beziehungen, speziell des effektiven Trägheitsmoments von Θ_0 , noch etwas genauer, so ist zu berücksichtigen, daß die Zustände $|0\rangle$ und $|n\rangle$ als Eigenzustände von H_0 nach (B,7a) natürlich von Θ_0 abhängen. Im Grenzfall $\Theta_0 \rightarrow \infty$ (Rumpf mit sehr großem Trägheitsmoment) erhält man

$$\begin{aligned} H_0 &\rightarrow H_0^{(0)} = - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i + V \\ |0\rangle &\rightarrow |0\rangle_0 & \text{bzw.} & & |n\rangle &\rightarrow |n\rangle_0 & (B,19) \\ E_0 &\rightarrow E_0^{(0)} & & & E_n &\rightarrow E_n^{(0)} \end{aligned}$$

Für sehr große Θ_0 läßt sich dann die Formel für Θ_{eff} folgendermaßen schreiben :

$$\Theta_{eff} = \Theta_0 + 2 \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n | j, | 0 \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}} + O\left(\frac{1}{\Theta_0}\right) \quad (B,20)$$

Dies bedeutet, daß das Zusatzträgheitsmoment, das auf Grund der Außenteilchen zu dem des Rumpfes hinzutritt, gegeben ist durch die Cranking-Formel [5,6]

$$\Theta_{cr} = 2 \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n | j, | 0 \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}} \quad (B,21)$$

Die Zustände, die in diese Beziehung eingehen, sind die deformierten Eigenzustände von H_0 , also Zustände, die nicht mehr abhängen vom Rumpfträgheitsmoment Θ_0 .

Die Cranking-Formel (B,21) wird bekanntlich im allgemeinen nicht auf Systeme, bestehend aus Rumpf und mehreren Außenteilchen, angewendet, sondern auf Systeme von vielen Teilchen, die für sich alleine vorhanden sind. Wie dies mit dem eben Gesagten zusammenhängt und zu vereinbaren ist, wird in Teil C behandelt.

Nach unseren allgemeinen Überlegungen aus Teil A sollten nun aber die obigen Ergebnisse nicht nur durch Störungsrechnung - wie hier geschehen - , sondern auch durch eine optimale Wahl des körperfesten Koordinatensystems zu erhalten sein. Dies soll in den folgenden Abschnitten untersucht werden.

II. Behandlung durch spezifische Entkopplung

1. Veränderung des körperfesten Systems und Extremalprinzip

Die Definition des körperfesten Systems, das in Abschnitt B.I als am Rumpf hängend gegeben war, ist noch nicht optimal. Deshalb wird jetzt ein neues körpergebundenes Koordinatensystem mit Hilfe der Einheitsvektoren $\tilde{\underline{e}}_a$ eingeführt, das gegenüber dem Rumpfsystem (Einheitsvektoren $\underline{e}_a$) verdreht ist. Die Bezeichnung ist dabei analog zu der in Abschnitt A.II :

$$\tilde{\underline{e}}_a = t_{ba}(x) \underline{e}_b \quad (B,22)$$

Die Drehmatrix $t_{ba}(x)$ ist allein von den inneren Koordinaten abhängig; dies sind hier die auf das Rumpfsystem bezogenen Teilchenkoordinaten x .

Wir charakterisieren die Drehmatrix $t_{ba}(x)$ durch drei Eulersche Winkel $\alpha(x)$, $\beta(x)$, $\gamma(x)$. Diese sind nicht zu verwechseln mit den Eulerschen Winkeln $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$, die zum Rumpf hin gezählt werden; die letzteren werden im folgenden nicht mehr explizit verwendet.

Der Zusammenhang der verschiedenen Koordinaten ist nochmals aus Abb.1 ersichtlich.

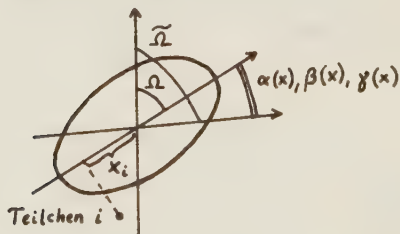


Abb.1 : Koordinaten beim Rotor + Particle - Modell

a) Um den Hamiltonoperator durch die neuen Eulerschen Winkel $\tilde{\Omega}$ auszudrücken, sind die Transformationsformeln (A,29) aus Abschnitt A.II.2 auf den hier vorliegenden Fall anzuwenden. Dazu hat man aus (B,7) die Koeffizienten M_{jl}^{-1} , $A_{j,a}$ und Θ_{ab}^{-1} zu entnehmen und daraus die entsprechenden in den neuen Hamiltonoperator eingehenden Größen $\tilde{M}_{jl}^{-1}$, $\tilde{A}_{j,a}$ und $\tilde{\Theta}_{ab}^{-1}$ zu errechnen. Im einzelnen ist dies in Anhang D.VII durchgeführt. Wir geben hier das Ergebnis für den neuen Trägheitstensor an, der für das Extremalprinzip benötigt wird :

$$\begin{aligned} \tilde{\Theta}_{ab}^{-1} = & \frac{1}{m} T_{a,x_{ic}} T_{b,x_{ic}} + \frac{1}{\Theta_0} (T_{a,1} T_{b,1} + T_{a,2} T_{b,2} - \\ & - T_{a,1} t_{1b} - T_{a,2} t_{2b} - T_{b,1} t_{1a} - T_{b,2} t_{2a} + \\ & + t_{1a} t_{1b} + t_{2a} t_{2b}) \end{aligned} \quad (B,23)$$

Als Abkürzung ist dabei der Ausdruck $T_{a,c}$ (für $c = 1,2$) verwendet :

$$T_{a,c} = \varepsilon_{cfj} x_{if} T_{a,x_{ij}} \quad (B,24)$$

Die Größen $T_{a,x_{ic}}$ entsprechen den $T_{a,j}$ aus Abschnitt A.II (hier ist ja q_j analog zu x_{ic}), also nach (A,26)

$$T_{a,x_{ic}} = \frac{1}{2} \varepsilon_{abc} (\nabla_i t_{fb}) t_{fc} \quad (B,25)$$

Ausgedrückt durch die Eulerschen Winkel $\alpha(x)$, $\beta(x)$, $\gamma(x)$ lassen sich diese Größen schreiben als (vgl. Anhang D.V)

$$\begin{aligned} T_{1,x_i} &= -\sin\beta \cos\gamma (\nabla_i \alpha) + \sin\gamma (\nabla_i \beta) \\ T_{2,x_i} &= \sin\beta \sin\gamma (\nabla_i \alpha) + \cos\gamma (\nabla_i \beta) \\ T_{3,x_i} &= \cos\beta (\nabla_i \alpha) + \nabla_i \gamma \end{aligned} \quad (B,26)$$

b) Nach den Überlegungen aus Abschnitt B.I haben wir hier das Extremalprinzip für (K=0)-Banden zu verwenden.

Dieses lautet also :

$$\Theta_{eff}^{-1} = \frac{1}{2} \langle \Psi_0 | \tilde{\Theta}_{11}^{-1} + \tilde{\Theta}_{22}^{-1} | \Psi_0 \rangle = Min. ! \quad (B, 27)$$

Wir berechnen die Größe $\frac{1}{2} (\tilde{\Theta}_{11}^{-1} + \tilde{\Theta}_{22}^{-1})$ aus der Formel (B, 23) mit Hilfe von (B, 26) und erhalten dann (Einzelheiten entnehme man aus Anhang D.VII) :

$$\begin{aligned} \Theta_{eff}^{-1} = & \langle \Psi_0 | \frac{1}{2m} \sum_i \left[\sin^2 \beta (\nabla_i \alpha)^2 + (\nabla_i \beta)^2 \right] + \\ & + \frac{1}{2\Theta_0} \left[\sin^2 \beta \left\{ \left(\frac{i}{\hbar} j_{1\alpha} \right)^2 + \left(\frac{i}{\hbar} j_{2\alpha} \right)^2 \right\} + \left(\frac{i}{\hbar} j_{1\beta} \right)^2 + \left(\frac{i}{\hbar} j_{2\beta} \right)^2 + \right. \\ & + 2 \sin \beta \cos \beta \left(\cos \alpha \frac{i}{\hbar} j_{1\alpha} + \sin \alpha \frac{i}{\hbar} j_{2\alpha} \right) + \\ & \left. + 2 \left(\sin \alpha \frac{i}{\hbar} j_{1\beta} - \cos \alpha \frac{i}{\hbar} j_{2\beta} \right) + 2 - \sin^2 \beta \right] | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (B, 28)$$

Dies ist jetzt nur noch ein Funktional von $\alpha(x)$ und $\beta(x)$, bestimmt also die neue optimale 3-Achse, die bezüglich des Ausgangszustands Ψ_0 zur spezifischen Entkopplung führt. Die Tatsache, daß die 3-Achse allein maßgebend ist, hatten wir ja früher schon als allgemeine Eigenschaft der (K=0)-Banden erkannt.

Durch Variation des Funktional (B, 28) erhalten wir die Eulerschen Gleichungen, also die Differentialgleichungen zur Bestimmung von $\alpha(x)$ und $\beta(x)$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{m} \nabla_i \left(\Psi_0^2 \sin^2 \beta \nabla_i \alpha \right) + \frac{1}{\Theta_0} \left[\frac{i}{\hbar} j_{1\alpha} \left(\Psi_0^2 \sin^2 \beta \frac{i}{\hbar} j_{1\alpha} \right) + \right. \\ + \frac{i}{\hbar} j_{2\alpha} \left(\Psi_0^2 \sin^2 \beta \frac{i}{\hbar} j_{2\alpha} \right) + \cos \alpha \frac{i}{\hbar} j_{1\alpha} \left(\Psi_0^2 \sin \beta \cos \beta \right) + \\ \left. + \sin \alpha \frac{i}{\hbar} j_{1\beta} \left(\Psi_0^2 \sin \beta \cos \beta \right) - \Psi_0^2 \left(\cos \alpha \frac{i}{\hbar} j_{1\beta} + \sin \alpha \frac{i}{\hbar} j_{2\beta} \right) \right] = 0 \end{aligned} \quad (B, 29a)$$

und

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{m} \nabla_i (\Psi_0^2 \nabla_i \beta) - \frac{1}{m} \sin \beta \cos \beta (\nabla_i \alpha) (\nabla_i \alpha) + \\
 & + \frac{1}{\Theta_0} \left[\frac{i}{\hbar} j_1 (\Psi_0^2 \frac{i}{\hbar} j_1 \beta) + \frac{i}{\hbar} j_2 (\Psi_0^2 \frac{i}{\hbar} j_2 \beta) - \right. \\
 & - \Psi_0^2 \sin \beta \cos \beta \left\{ \left(\frac{i}{\hbar} j_1 \alpha \right)^2 + \left(\frac{i}{\hbar} j_2 \alpha \right)^2 \right\} - \\
 & - \Psi_0^2 (\cos^2 \beta - \sin^2 \beta) \left(\cos \alpha \frac{i}{\hbar} j_1 \alpha + \sin \alpha \frac{i}{\hbar} j_2 \alpha \right) + \\
 & \left. + \frac{i}{\hbar} j_1 (\Psi_0^2 \sin \alpha) - \frac{i}{\hbar} j_2 (\Psi_0^2 \cos \alpha) + \Psi_0^2 \sin \beta \cos \beta \right] = 0
 \end{aligned} \tag{B,29b}$$

Im allgemeinen Fall sind dies recht komplizierte nicht-lineare Gleichungen.

Betrachtet man aber etwa den Spezialfall, daß die Außen-
 teilchenwellenfunktion $\Psi_0 = \Psi_0(x)$ nicht deformiert,
 also drehinvariant ist (physikalisch ist dies kein sehr
 interessanter Fall), so sieht man aus (B,29a,b), daß
 $\beta(x) = 0$ diese Gleichungen löst. D.h. in diesem Fall
 wäre schon das ursprüngliche, am Rumpf hängende Koordin-
 natensystem das optimale, was auch daraus ersichtlich
 ist, daß bei drehinvariantem Ψ_0 die Wirkung der Kopp-
 lungsglieder (B,7b) auf Ψ_0 verschwindet.

Neben diesem rein mathematisch interessanten Fall ist
 aber der Grenzfall großen Rumpfrägheitsmoments Θ_0 das,
 was uns eigentlich interessiert. Es sollte sich dann
 zeigen, daß man für das Zusatzträgheitsmoment die Cran-
 king-Formel (B,21) erhält. Deshalb behandeln wir diesen
 Fall im nächsten Abschnitt.

2. Die Extremalgleichungen für den Grenzfall $\Theta_0 \rightarrow \infty$

Wenn das Rumpfrägheitsmoment Θ_0 sehr groß wird, entfallen in den früheren Formeln die Terme mit $\frac{1}{\Theta_0}$ und man erkennt aus der Formel (B,28) für Θ_{eff}^{-1} , daß im Grenzfall $\Theta_0 \rightarrow \infty$ sich die Lösung $\beta(x) = 0$ ergibt, d.h. dann bleibt das Koordinatensystem immer am Rumpf angeheftet, wie man auch anschaulich erwartet. Bei großem, aber nicht unendlichem Θ_0 schwankt also die β -Achse nur wenig um die Symmetrieachse des Rumpfes.

Deshalb können wir im Sinne einer Entwicklung nach $\frac{1}{\Theta_0}$ schreiben :

$$\beta(x) = \frac{1}{\Theta_0} \bar{\beta}(x) + O\left(\frac{1}{\Theta_0^2}\right) \quad (B,30)$$

Den Grenzwert von $\alpha(x)$ für $\Theta_0 \rightarrow \infty$ bezeichnen wir weiterhin mit $\alpha(x)$.

Damit läßt sich das reziproke effektive Trägheitsmoment ebenfalls entwickeln in der folgenden Form :

$$\begin{aligned} \Theta_{eff}^{-1} = & \frac{1}{\Theta_0} + \frac{1}{\Theta_0^2} \langle \Psi_0^{(0)} | \frac{1}{2m} \sum_i [\bar{\beta}^2 (\nabla_i \alpha)^2 + (\nabla_i \bar{\beta})^2] + \\ & + \bar{\beta} \left(\cos \alpha \frac{i}{\hbar} j_1 \alpha + \sin \alpha \frac{i}{\hbar} j_2 \alpha \right) + \\ & + \sin \alpha \frac{i}{\hbar} j_1 \bar{\beta} - \cos \alpha \frac{i}{\hbar} j_2 \bar{\beta} | \Psi_0^{(0)} \rangle + O\left(\frac{1}{\Theta_0^3}\right) \end{aligned} \quad (B,31)$$

Dabei haben wir im Sinne einer konsequenten Entwicklung nach $\frac{1}{\Theta_0}$ für die Wellenfunktion Ψ_0 ihren Grenzwert $\Psi_0^{(0)} = |0\rangle_0$ für $\Theta_0 \rightarrow \infty$ (vgl. (B,19)) eingesetzt.

Die Größe, die zu minimalisieren ist, ist jetzt der Erwartungswert aus (B,31). Dies läßt sich auch folgendermaßen umformulieren :

Das effektive Trägheitsmoment schreibt sich als

$$\Theta_{eff} \approx \Theta_0 + \Theta_{zus} \quad , \quad (B,32)$$

wobei das Zusatzträgheitsmoment Θ_{zus} aus der Extremalisierung des Funktionals

$$\begin{aligned} \Theta_{zus} = - \langle \Psi_0^{(0)} | \frac{1}{2m} \sum_i [\bar{\beta}^2 (\nabla_i \alpha)^2 + (\nabla_i \bar{\beta})^2] + \\ + \bar{\beta} (\cos \alpha \frac{i}{\hbar} j_1 \alpha + \sin \alpha \frac{i}{\hbar} j_2 \alpha) + \\ + \sin \alpha \frac{i}{\hbar} j_1 \bar{\beta} - \cos \alpha \frac{i}{\hbar} j_2 \bar{\beta} | \Psi_0^{(0)} \rangle \end{aligned} \quad (B,33)$$

bezüglich der Funktionen $\alpha(x)$ und $\bar{\beta}(x)$ zu gewinnen ist.

Für die weitere Untersuchung führen wir zweckmäßigerweise die folgenden Abkürzungen ein :

$$\begin{aligned} \bar{S}_1 &= -\bar{\beta} \sin \alpha \\ \bar{S}_2 &= \bar{\beta} \cos \alpha \end{aligned} \quad (B,34)$$

Dann läßt sich das Funktional (B,33) in die folgende einfachere Form bringen :

$$\begin{aligned} \Theta_{zus} = \langle \Psi_0^{(0)} | -\frac{1}{2m} \sum_i [(\nabla_i \bar{S}_1)^2 + (\nabla_i \bar{S}_2)^2] + \\ + \frac{i}{\hbar} j_1 \bar{S}_1 + \frac{i}{\hbar} j_2 \bar{S}_2 | \Psi_0^{(0)} \rangle \end{aligned} \quad (B,35)$$

Die zugehörigen Eulerschen Gleichungen entkoppeln dann für $\bar{S}_1$ und $\bar{S}_2$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{m} \nabla_i (\Psi_0^{(0)2} \nabla_i \bar{S}_1) &= \frac{i}{\hbar} j_1 (\Psi_0^{(0)2}) \\ \frac{1}{m} \nabla_i (\Psi_0^{(0)2} \nabla_i \bar{S}_2) &= \frac{i}{\hbar} j_2 (\Psi_0^{(0)2}) \end{aligned} \quad (B,36)$$

Zur Lösung von (B,36) erinnern wir uns an die Störungsrechnung in Abschnitt B.I.2 , deren Äquivalenz mit der spezifischen Entkopplung wir im folgenden ausnützen.

3. Lösung durch Vergleich mit der Störungsrechnung (Spezifische Entkopplung der Wellenfunktionen)

Die durch Störungsrechnung gewonnenen Wellenfunktionen (B,16) sind ausgedrückt durch die alten Eulerschen Winkel, die auf das Rumpfsystem bezogen sind, und liegen noch nicht in der spezifisch entkoppelten Form vor, was die Terme 1. Ordnung proportional zu $\sqrt{J(J+1)}$ zeigen. Das neue körperfeste System mit den Eulerschen Winkeln $\tilde{\Omega}$ ist jedoch das optimale System der spezifischen Entkopplung. Wenn man also die Wellenfunktionen (B,16) auf die Eulerschen Winkel $\tilde{\Omega} = t(x) \cdot \Omega$ umrechnet, sollten die Glieder 1. Ordnung entfallen, wie es die allgemeine Theorie nach A.III.1 verlangt. Deshalb setzen wir

$$\Omega = t^{-1}(x) \cdot \tilde{\Omega}$$

ein und erhalten dann :

$$\begin{aligned} \Psi^{\mathcal{M}} = & \Psi_0(x) | \mathcal{M} K \rangle_{\tilde{\Omega}} D_{0K}^{\mathcal{F}}(t) + \frac{\hbar}{2\Theta_0} \sqrt{J(J+1)} \sum_{n \neq 0} \Psi_n(x) \cdot \\ & \cdot \left(\frac{\langle n | j+10 \rangle}{E_n - E_0} | \mathcal{M} K \rangle_{\tilde{\Omega}} D_{1K}^{\mathcal{F}}(t) + \frac{\langle n | j-10 \rangle}{E_n - E_0} | \mathcal{M} K \rangle_{\tilde{\Omega}} D_{-1K}^{\mathcal{F}}(t) \right) \end{aligned}$$

(B,37)

Für großes Θ_0 verwenden wir die Entwicklung (B,30) für β und können dann für die D-Funktionen schreiben (s. Anhang D.II) :

$$\begin{aligned} D_{0K}^{\mathcal{F}}(t) &= \delta_{K0} + \frac{1}{2\Theta_0} \sqrt{J(J+1)} \bar{\beta} (e^{-i\gamma} \delta_{K,1} - e^{+i\gamma} \delta_{K,-1}) + O\left(\frac{1}{\Theta_0^2}\right) \\ D_{\pm 1K}^{\mathcal{F}}(t) &= \delta_{K,\pm 1} e^{\mp i(\alpha+\gamma)} + O\left(\frac{1}{\Theta_0}\right) \end{aligned}$$

(B,38)

Diese Ausdrücke lassen sich in Formel (B,37) einsetzen; daher erhalten wir für die Wellenfunktionen bis zur 1. Ordnung :

$$\begin{aligned}
 \Psi^{JM} &= \Psi_0(x) |JM0\rangle_{\tilde{n}} + \\
 &+ \frac{1}{2\Theta_0} \sqrt{J(J+1)} \left[\Psi_0^{(0)} \cdot \bar{\beta} + \hbar \sum_{n \neq 0} \frac{\langle n | j_1 | 0 \rangle_0}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}} \Psi_n^{(0)} e^{-i\alpha} \right] \cdot \\
 &\quad \cdot e^{-i\gamma} |JM1\rangle_{\tilde{n}} - \\
 &- \frac{1}{2\Theta_0} \sqrt{J(J+1)} \left[\Psi_0^{(0)} \cdot \bar{\beta} - \hbar \sum_{n \neq 0} \frac{\langle n | j_2 | 0 \rangle_0}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}} \Psi_n^{(0)} e^{i\alpha} \right] \cdot \\
 &\quad \cdot e^{i\gamma} |JM-1\rangle_{\tilde{n}} + O\left(\frac{1}{\Theta_0^2}\right)
 \end{aligned} \tag{B,39}$$

Die Forderung nach Verschwinden der Terme 1. Ordnung lautet damit :

$$\bar{\beta} e^{\pm i\alpha} \Psi_0^{(0)} = \mp \hbar \sum_{n \neq 0} \Psi_n^{(0)} \frac{\langle n | j_{\pm} | 0 \rangle_0}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}} \tag{B,40}$$

Daraus gewinnt man schließlich die Größen $\bar{S}_1$ und $\bar{S}_2$ nach (B,34) :

$$\begin{aligned}
 \bar{S}_1(x) &= \frac{\hbar}{i} \sum_{n \neq 0} \frac{\Psi_n^{(0)}(x)}{\Psi_0^{(0)}(x)} \frac{\langle n | j_1 | 0 \rangle_0}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}} \\
 \bar{S}_2(x) &= \frac{\hbar}{i} \sum_{n \neq 0} \frac{\Psi_n^{(0)}(x)}{\Psi_0^{(0)}(x)} \frac{\langle n | j_2 | 0 \rangle_0}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}}
 \end{aligned} \tag{B,41}$$

Man sieht also, daß hier die alleinige Forderung nach spezifischer Entkopplung der Wellenfunktionen (Produktform bis zur 2. Ordnung) dazu benützt werden kann, die Lösung des Extremalprinzips zu finden, ohne vom Extremalprinzip selbst Gebrauch zu machen. Zur Nachprüfung der Konsistenz dieser Überlegungen wollen wir im nächsten Punkt die Lösung (B,41) auf direktem Weg bestätigen.

4. Direkte Lösung des Extremalprinzips

Die Überlegungen des vorigen Abschnitts über die entkoppelte Form der Wellenfunktionen haben uns auf die Formeln (B,41) für $\bar{\Psi}_1$ und $\bar{\Psi}_2$ geführt.

(Daß diese Formeln reelle Funktionen liefern, kann man leicht einsehen, wie in Anhang D.VI gezeigt ist.)

Im Hinblick auf spätere Anwendungen wollen wir hier zeigen, daß das Extremalprinzip (B,35) ohne Rückgriff auf die Störungsrechnung zu lösen ist.

Wir gehen dazu aus von der Entwicklung

$$\bar{\Psi}_1 \cdot \Psi_0^{(0)} = \sum_n a_n \Psi_n^{(0)} \quad (\text{B,42})$$

Dabei sind die Wellenfunktionen $\Psi_n^{(0)}$ die Eigenfunktionen zum Hamiltonoperator $H_0^{(0)}$ aus (B,19).

Es gilt also :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i + V \right) \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)} \quad (\text{B,43})$$

Die Entwicklung (B,42) ist deswegen gerechtfertigt, weil die Eigenfunktionen $\Psi_n^{(0)}$ ein vollständiges Funktionensystem bilden.

Damit können wir die linke Seite von (B,36) errechnen, was den folgenden Ausdruck ergibt :

$$\frac{1}{m} \nabla_i \left(\Psi_0^{(0)2} \nabla_i \bar{\Psi}_1 \right) = \sum_n a_n \left[\Psi_0^{(0)} \frac{1}{m} \sum_i \Delta_i \Psi_n^{(0)} - \Psi_n^{(0)} \frac{1}{m} \sum_i \Delta_i \Psi_0^{(0)} \right]$$

Setzen wir hier die Eigenwertgleichung (B,43) für die $\Psi_n^{(0)}$ ein, so erhalten wir (wegen der Lokalität der potentiellen Energie $V = V(x)$)

$$-\frac{2}{\hbar^2} \sum_n a_n \left(E_n^{(0)} - E_0^{(0)} \right) \Psi_0^{(0)} \Psi_n^{(0)}$$

Gleichsetzung dieses Ausdrucks mit der rechten Seite von (B,36)

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} j_1 (\Psi_0^{(0)}) &= 2 \frac{i}{\hbar} \Psi_0^{(0)} j_1 \Psi_0^{(0)} \\ &= 2 \frac{i}{\hbar} \sum_n \langle n | j_1 | 0 \rangle_0 \Psi_0^{(0)} \Psi_n^{(0)} \end{aligned}$$

führt für die Koeffizienten a_n schließlich zu folgendem Ergebnis :

$$a_n = \frac{\hbar}{i} \frac{\langle n | j_1 | 0 \rangle_0}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}} \quad \text{für } n \neq 0 \quad (\text{B,44})$$

Der Koeffizient a_0 bleibt unbestimmt und kann, da er nur eine unwesentliche Konstante in $\bar{S}_1$ liefert, Null gesetzt werden.

Für $\bar{S}_2$ erhält man natürlich das entsprechende Resultat; man ersetze einfach j_1 durch j_2 .

Damit ist bestätigt, daß die Formeln (B,41) die Lösungen der Differentialgleichungen (B,36) darstellen.

Die eben gezeigte Möglichkeit, mit Hilfe des Ansatzes der Form (B,42) inhomogene Differentialgleichungen mit der Struktur (B,36) unter Benützung der Eigenwertgleichungen (B,43) zu lösen, wird sich auch in Teil C als sehr nützlich erweisen.

Mit den Lösungen (B,41) für $\bar{S}_1$ und $\bar{S}_2$ läßt sich jetzt auch der Wert des Funktionals (B,35) und damit das Zusatzträgheitsmoment Θ_{zus} errechnen und das Ergebnis (B,21) der Störungsrechnung von dieser Seite her bestätigen. Dabei kann man mit Vorteil von den Differentialgleichungen (B,36) Gebrauch machen.

Multiplikation der ersten bzw. der zweiten Zeile von (B,36) mit $\bar{S}_1$ bzw. $\bar{S}_2$ und Integration über die Teilchenkoordinaten x ergibt nämlich nach Ausführung einer partiellen Integration :

$$\langle 0 | \frac{1}{m} \sum_i (\vec{p}_i \vec{S}_i)^2 | 0 \rangle = \langle 0 | \frac{1}{\hbar} \vec{J}_1 \vec{S}_1 | 0 \rangle \quad (\text{B, 45})$$

Also gilt :

$$\Theta_{245} = \frac{1}{2} \left(\langle 0 | \frac{1}{\hbar} \vec{J}_1 \vec{S}_1 | 0 \rangle + \langle 0 | \frac{1}{\hbar} \vec{J}_2 \vec{S}_2 | 0 \rangle \right) \quad (\text{B, 46})$$

Die weitere Berechnung dieser Matrixelemente liefert die beiden Ausdrücke

$$\langle 0 | \frac{1}{\hbar} \vec{J}_1 \vec{S}_1 | 0 \rangle = 2 \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n | \vec{J}_1 | 0 \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}} \quad , \quad (\text{B, 47})$$

die, wie man aus Anhang D.VI sieht, den gleichen Wert ergeben.

Es folgt also :

$$\Theta_{245} = 2 \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n | \vec{J}_1 | 0 \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}} = \Theta_{cr} \quad (\text{B, 48})$$

Damit sind die Ergebnisse der Störungsrechnung vollständig durch die Methode der spezifischen Entkopplung reproduziert.

Man sieht, daß der Zahlenwert, den die Cranking-Formel liefert, auch durch ein Extremalprinzip, nämlich durch (B,35) erhalten werden kann, bei dem nichts davon zu erkennen ist, daß die Cranking-Formel etwas mit Störungsrechnung zu tun hat. So geht in dieses Extremalprinzip ja auch nur die Kenntnis der Grundzustandswellenfunktion $\Psi_0^{(0)}$ ein. Dies steht nicht im Widerspruch dazu, daß in (B,48) auch die angeregten Zustände $\Psi_n^{(0)}$ vorkommen; denn bei vorgegebenem $\Psi_0^{(0)}$ läßt sich aus der Eigenwertgleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i + V \right) \Psi_0^{(0)} = E_0^{(0)} \Psi_0^{(0)} \quad (\text{B, 49})$$

auf das Potential V und damit auf das gesamte Anregungsspektrum zurückschließen.

Die Cranking-Formel, von der hier gezeigt wurde, daß sie das Zusatzträgheitsmoment für mehrere Teilchen außerhalb eines Rumpfs mit sehr großem Trägheitsmoment angibt, ist selbstverständlich nicht nur anwendbar, wenn sich die Außenteilchen unabhängig in dem deformierten Potential des Rumpfes bewegen (häufig wird sie nur für diesen Fall angegeben). Sie gilt auch bei beliebiger Wechselwirkung zwischen den Teilchen, so z.B. bei einer Paarkraft, was zur Cranking-Formel mit Paarung führt [42] . Dies wird sich später als wichtig erweisen, wo wir noch in einem anderen Zusammenhang (bei der Behandlung von gg-Kernen) auf diese Formel stoßen werden.

Teil C

Anwendung der allgemeinen Theorie auf deformierte gg-Kerne

Die allgemeinen Überlegungen aus Teil A zur Behandlung von kollektiven Rotationen sollen hier angewendet werden auf deformierte gg-Kerne. Dabei verzichten wir auf eine explizite Berücksichtigung des Spins der einzelnen Nukleonen.

Bekanntlich ist die Vorstellung von der Deformation eines Kerns mit Modellen wie dem Nilsson-Modell [40] verknüpft, bei dem sich die Nukleonen in einem deformierten mittleren Potential unabhängig voneinander bewegen. Auch die Verfeinerung dieses Bildes, etwa durch Hartree-Fock- oder Hartree-Fock-Bogolyubov-Rechnungen läßt die wesentlichen Züge dieser Vorstellung unverändert [51].

Gemäß den Erkenntnissen aus Teil A sollte nun aber der drehimpulsfreie Grundzustand eines gg-Kerns beschrieben werden durch eine Wellenfunktion der Form

$$\Psi_0 = \Psi_0(q) \quad , \quad (C,1)$$

die als Funktion der inneren Koordinaten q gegeben ist.

Es taucht also die Frage auf, wie in diesem Rahmen der Begriff der Deformation zu fassen ist.

Bei der Behandlung dieses Problems erweist es sich als notwendig, auf Koordinaten zurückzugreifen, die den Einzelteilchen des Systems zugeordnet sind. Dabei wird sich auch ganz von selbst ein Zusammenhang mit den oben erwähnten Modellvorstellungen ergeben.

I. Intrinsisch-deformierte Wellenfunktionen

Die oben skizzierten Modelle gehen aus von der Bewegung der Teilchen in einem deformierten Potential. Dahinter steckt offenbar die Vorstellung, daß die so beschriebene innere Bewegung in einem körperfesten Bezugssystem stattfindet. Von der Deformation des Kerns kann man dann nur sprechen, wenn man sich auf dieses innere System bezieht. Der Begriff der Deformation ist also aufs engste verknüpft mit der Definition eines körperfesten Koordinatensystems [44].

Wir stellen uns hier vor, wir hätten das optimale innere Koordinatensystem, in welchem spezifische Entkopplung vorliegt, bereits gefunden. Wie sich später herausstellt, ist dies dann dasjenige Bezugssystem, in dem auch die Deformation zu beschreiben ist.

1. Körperfeste Koordinaten

Zur Behandlung der Teilchenbewegung in diesem körperfesten Koordinatensystem ist es zweckmäßig, Koordinaten einzuführen, die auf dieses System bezogen sind.

Man bildet also die körperfesten Teilchenkoordinaten

$$x'_{ia} = \underline{x}_i \cdot \underline{e}_a(x) \quad (i=1, \dots, N; a=1, 2, 3) \quad (C,2)$$

Die Bezeichnungen sind analog zu denen in Teil A.

Die Freiheitsgrade, die mit der Bewegung des Schwerpunkts verbunden sind (kollektive Translation), unterdrücken wir im folgenden, da wir hauptsächlich an den kollektiven Rotationen interessiert sind. Andernfalls müßte die Beziehung (C,2) durch Einführung des Schwerpunktsvektors $\underline{Q}$ folgendermaßen modifiziert werden :

$$x'_{ia} = (\underline{x}_i - \underline{Q}) \cdot \underline{e}_a \quad (C,3)$$

Es zeigt sich, wie zu erwarten ist, daß die dadurch

hervorgerufenen Effekte bei großer Teilchenzahl zu vernachlässigen sind.

Die nach (C,2) definierten x' -Koordinaten sind allerdings nicht unabhängig; denn wenn man eine bestimmte (raumfeste) x -Konfiguration einer Drehung unterwirft, ändert das nichts an den körperfesten x' -Komponenten. Somit lassen sich die x' -Werte aus (C,2) durch $(3N-3)$ unabhängig veränderliche innere Koordinaten q_j charakterisieren - die Zahl $(3N-3)$ tritt hier auf, weil wir die Schwerpunktsbewegung vernachlässigen - :

$$x'_{ia} = x'_{ia}(q_1, \dots, q_{3N-3}) = x'_{ia}(q) \quad (C,4)$$

Die Beziehung (C,4) gibt die Parameterdarstellung einer $(3N-3)$ -dimensionalen Hyperfläche an, die wir als eingebettet betrachten in den $3N$ -dimensionalen Raum von unabhängig veränderlichen x' -Werten.

Diesen durch (C,2) oder (C,4) definierten Bereich bezeichnen wir als den physikalischen Bereich im gesamten $3N$ -dimensionalen x' -Raum.

Eine weitere Möglichkeit, den physikalischen x' -Bereich zu charakterisieren, besteht in der Beziehung

$$e_{a\mu}(x') = \delta_{a\mu} \quad (C,5)$$

oder, ausgedrückt durch die Eulerschen Winkel Ω , die dem Dreibein $\underline{e}_a$ entsprechen :

$$\Omega(x') = 0 \quad (C,6)$$

Die Ausdrücke in (C,5) bzw. (C,6) sind folgendermaßen zu verstehen : Die Einheitsvektoren $\underline{e}_a$ bzw. die Eulerschen Winkel Ω sind ursprünglich gegeben als Funktionen der raumfesten Teilchenkoordinaten x ; die Ersetzung der x -Koordinaten durch die körperfesten x' -Koordinaten ($x_{i\mu} \longleftrightarrow x'_{ia}$) liefert dann die obigen Ausdrücke. Dabei ist es notwendig, eine formale Identifikation der kör-

perfesten Indizes $a = 1, 2, 3$ mit den raumfesten Indizes $\mu = x, y, z$ vorzunehmen.

Der Grund für die Gültigkeit von (C,5) und (C,6) liegt in der Mitdreheigenschaft der körperfesten Achsen, was sich, bei einem rein formalen Beweis, so ausdrückt :

$$e_{a\mu}(x') \Big|_{p.B.} = e_{a\mu}(x'_{i,b} = e_{b\nu} x_{i\nu}) = e_{\mu\nu}(x) e_{a\nu}(x) = \delta_{a\mu} \quad (C,7)$$

Die Beziehungen (C,5) oder (C,6) sind somit implizite Definitionsgleichungen für die Hyperfläche des physikalischen Bereichs. Äquivalent dazu ist die Aussage, daß diese Beziehungen als implizite Bestimmungsgleichungen für das körperfeste Koordinatensystem anzusehen sind.

Zur Verdeutlichung kann man sich die Struktur des x' -Raums auch noch geometrisch vorstellen, so wie es in Abb.2 angedeutet ist. Dies ist für spätere Überlegungen ganz nützlich.

Ausgehend von der Hyperfläche des physikalischen Bereichs lassen sich durch Verdrehung bezüglich der x' -Koordinaten alle möglichen anderen, nicht-physikalischen x' -Konfigurationen erzeugen, für die $\Omega(x') \neq 0$ gilt. Eine Drehung soll dabei der Bewegung längs der eingezeichneten Hyperflächen-Trajektorien entsprechen.

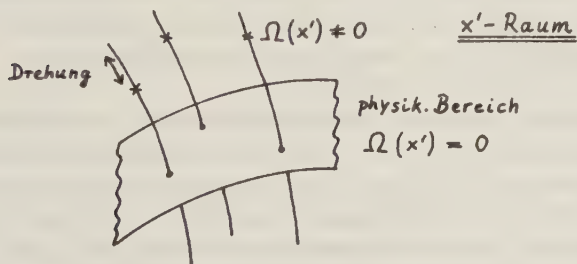


Abb.2 : Physikalischer Bereich, eingebettet im gesamten x' -Raum

2. Struktur der Wellenfunktionen (Intrinsic-Wellenfunktionen)

Für die Frage nach den Wellenfunktionen wollen wir zuerst einige heuristische Überlegungen anstellen.

Wir nehmen an, wir hätten zur Beschreibung der inneren Bewegung, also für den Grundzustand, eine deformierte Wellenfunktion, etwa eine Nilsson-Funktion. Diese "Intrinsic-Wellenfunktion" ist dann aufzufassen als Funktion der körperfesten Teilchenkoordinaten, also

$$\Psi_0^{intr} = \Psi_0^{intr}(x') \quad (C,8)$$

Diese Wellenfunktion ist gegeben im gesamten 3N-dimensionalen x' -Raum. Allerdings sind von diesen x' -Werten nur diejenigen aus dem physikalischen Bereich von Bedeutung. Wenn wir also die x' -Werte in (C,8) auf den physikalischen Bereich beschränken, d.h. die Definition (C,2) für die körperfesten Koordinaten einsetzen, gewinnen wir aus der Intrinsic-Wellenfunktion (C,8) die echte physikalische Wellenfunktion Ψ_0 :

$$\Psi_0 = \Psi_0^{intr}(x'_a = x_i \cdot t_a(x)) = \Psi_0^{intr}(x')|_{\text{phys. Ber.}} \quad (C,9)$$

Die so definierte Wellenfunktion Ψ_0 ist dann in der mittleren Darstellung (C,9) als Funktion der raumfesten x -Koordinaten gegeben. Sie ist aber dreihinvariant bezüglich der x -Koordinaten, hängt also nur von den inneren Koordinaten q ab (vgl. (C,4)).

Wir erhalten somit aus einer Intrinsic-Wellenfunktion, die im Gesamtraum der x' -Koordinaten im anschaulichen Sinne deformiert ist, durch Einschränkung auf den physikalischen Bereich eine dreihinvariante, physikalische Wellenfunktion, der man die Deformation nicht mehr unmittelbar ansieht. Beschreibt etwa die Intrinsic-Funktion unabhängige "Teilchen" (in den x' -Koordinaten), so

enthält die daraus nach (C,9) gewonnene Wellenfunktion $\Psi_0 = \Psi_0(x)$ sehr starke Korrelationen zwischen den echten Teilchen, die genau der innerlichen Deformation der Wellenfunktion entsprechen, und beschreibt keineswegs mehr unabhängige Teilchen (in den x-Koordinaten).

Die Intrinsic-Wellenfunktion Ψ_0^{intr} ist in diesem Sinne nicht als echte Wellenfunktion aufzufassen, sondern als Modell-Wellenfunktion, aus der man mit Hilfe der Operation (C,9) die physikalische Wellenfunktion gewinnt. Das hier skizzierte Verfahren hat offensichtlich den Vorteil, daß man mit Koordinaten arbeiten kann, die (im Gegensatz zu den inneren Koordinaten) in unmittelbarem Zusammenhang mit den einzelnen Teilchen stehen, was z.B. die Antisymmetrisierung ohne Schwierigkeiten möglich macht.

Wenn wir es nicht mit dem ($J=0$)-Ausgangszustand, sondern mit einem Zustand der Form

$$\Psi^{JM}(q, \Omega) = \sum_K \Phi_K^J(q) |JM K\rangle_\Omega \quad (C,10)$$

zu tun haben, so können wir ganz entsprechend jede der inneren Funktionen $\Phi_K^J(q)$ ausdrücken durch eine im gesamten x' -Raum definierte Intrinsic-Funktion

$$\Phi_K^{J intr} = \Phi_K^{J intr}(x') \quad , \quad (C,11)$$

so daß gilt :

$$\Phi_K^J(q) = \Phi_K^{J intr}(x') \Big|_{\text{phys. Ber.}} \quad (C,12)$$

Wir haben damit für die Wellenfunktion (C,10) die Darstellung

$$\Psi^{JM}(q, \Omega) = \sum_K \Phi_K^{J intr}(x') \Big|_{\text{p.B.}} |JM K\rangle_\Omega \quad (C,13)$$

Die Frage, wie das System der Intrinsic-Funktionen zu bestimmen ist, d.h. wie der zugehörige Hamiltonoperator aussieht, soll uns im nächsten Abschnitt beschäftigen.

3. Intrinsic-Hamiltonoperator

Der ursprüngliche Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2m} \sum_i \mathbf{p}_i^2 + V_{ww} \quad (C,14)$$

wirkt auf die Wellenfunktionen (C,10) und liefert die Eigenwerte E_J :

$$H \Psi^{JM} = E_J \Psi^{JM} \quad (C,15)$$

Diese Eigenwertgleichung ist jetzt zu übertragen auf die Darstellung (C,13) der Eigenfunktionen Ψ^{JM} , die ausgedrückt sind durch Intrinsic-Funktionen auf dem physikalischen Bereich. Deshalb untersuchen wir zuerst die Wirkung des Linearimpulses $\underline{p}_i$ eines Teilchens auf die Wellenfunktion (C,13).

a) Umrechnung der Linearimpulse

Nach Abschnitt A.I.2 läßt sich schreiben (Vernachlässigung des Schwerpunktsanteils in Formel (A,7)) :

$$\begin{aligned} \underline{p}_i \Psi^{JM} &= e_a F_{a,j}^i \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial q_j} \Phi_K^J \right) |JM\rangle_\Omega + \\ &+ e_a B_{ab}^i \Phi_K^J \hat{J}_b |JM\rangle_\Omega \end{aligned} \quad (C,16)$$

Entnehmen wir aus Formel (A,8)

$$e_a F_{a,j}^i = \frac{\partial q_i}{\partial x_j} \quad (C,17)$$

und verwenden wir die Abkürzung

$$\underline{B}_b^i = e_a B_{ab}^i \quad , \quad (C,18)$$

so erhalten wir aus (C,16) (unter Berücksichtigung der Darstellung (C,12) der inneren Funktionen) :

$$\begin{aligned} \rho_i \Psi^{\mathcal{M}} = & \left(\frac{\hbar}{i} \nabla_i \Phi_K^{\mathcal{I} \text{ intr}}(x') \Big|_{\rho.B.} \right) |\mathcal{I}MK\rangle_{\Omega} + \\ & + \underline{B}_b^i \Phi_K^{\mathcal{I} \text{ intr}}(x') \Big|_{\rho.B.} \mathcal{I}_b |\mathcal{I}MK\rangle_{\Omega} \end{aligned} \quad (C,19)$$

Die Wirkung des Drehimpulsoperators im zweiten Term ist bekannt :

$$\mathcal{I}_b |\mathcal{I}MK\rangle_{\Omega} = |\mathcal{I}MK'\rangle_{\Omega} \langle \mathcal{I}K' | \mathcal{I}_b | \mathcal{I}K \rangle \quad (C,20)$$

Zur Berechnung des ersten Terms müssen wir die Darstellung (C,2) der körperfesten Koordinaten x' einsetzen; damit erhalten wir

$$\nabla_i \Phi_K^{\mathcal{I} \text{ intr}}(x') \Big|_{\rho.B.} = \frac{\partial \Phi_K^{\mathcal{I} \text{ intr}}}{\partial x'_{ia}} \Big|_{\rho.B.} \nabla_i (x_j \cdot e_a(x)) \quad (C,21)$$

Unter Berücksichtigung der aus (A,9) zu gewinnenden Beziehung

$$\nabla_i e_{a\mu} = \varepsilon_{cab} \varepsilon_f \underline{B}_{fc}^i e_{b\mu} = \varepsilon_{cab} \underline{B}_c^i e_{b\mu} \quad (C,22)$$

läßt sich dies schreiben als

$$\nabla_i \Phi_K^{\mathcal{I} \text{ intr}}(x') \Big|_{\rho.B.} = \left(\varepsilon_a \frac{\partial}{\partial x'_{ia}} - \underline{B}_c^i \cdot \frac{i}{\hbar} j_c' \right) \Phi_K^{\mathcal{I} \text{ intr}}(x') \Big|_{\rho.B.} \quad (C,23)$$

Dabei haben wir die Komponenten des Drehimpulses in x' -Koordinaten

$$j_c' = \frac{\hbar}{i} \varepsilon_{cab} x'_{ia} \frac{\partial}{\partial x'_{ib}} \quad (C,24)$$

eingeführt. Diese erfüllen, da die x'_{ia} in (C,24) als unabhängige Variable anzusehen sind, die normalen Vertauschungsrelationen. Bildet man dagegen die später noch benötigten körperfesten Komponenten

$$j_a^{KF'} = e_{ac}(x') j_c' \quad , \quad (C,25)$$

so erfüllen diese die anomalen Vertauschungsrelationen. Die Schreibweise $e_{ac}(x')$ ($c=1,2,3$) für die Komponenten der Einheitsvektoren in (C,25) ist wieder im Sinne der im Anschluß an (C,6) erläuterten Identifikation von körperfesten und raumfesten Indizes zu verstehen. Da auf dem physikalischen Bereich

$$e_{ac}(x') = \delta_{ac} \quad (C,26)$$

gilt, fallen die Komponenten (C,24) und (C,25) dort zusammen.

Setzen wir die Formel (C,23) in (C,19) ein, so erhalten wir schließlich (mit Hilfe der Bezeichnung $p'_{ia} = \frac{\hbar}{i} \partial/\partial x'_{ia}$ für die x' -Impulse) :

$$p_i \Psi^{JM} = \left[\varepsilon_a p'_{ia} + \underline{B}_a^i \cdot (\underline{J}_a - j_a') \right] \Phi_{\kappa}^{J \text{ intr}}(x') \Big|_{p.B.} |JMK\rangle_{\Omega} \quad (C,27)$$

Die Operatoren p'_{ia} und j_a' wirken in dieser Formel nur auf die Funktionen $\Phi_{\kappa}^{J \text{ intr}}$ (der Übergang auf den physikalischen Bereich ist natürlich stets am Schluß zu vollziehen), während der Drehimpulsoperator J_a auf die Kreisel Funktionen $|JMK\rangle_{\Omega}$ wirkt.

b) Berechnung des Intrinsic-Hamiltonoperators

Mit Hilfe der soeben abgeleiteten Formel (C,27) können wir die Wirkung des gesamten Hamiltonoperators (C,14) auf die Wellenfunktion (C,13) berechnen. Die ausführliche Rechnung findet sich in Anhang D.VIII. Dabei ist, neben der Einführung der körperfesten Drehimpuls Komponenten (C,25), der wichtigste Punkt dieser Ableitung die vollständige Elimination der x -Koordinaten. So treten als Koeffizienten bei den auf die x' -Koordinaten bzw. die Eulerschen Winkel wirkenden Operatoren im

umgerechneten Hamiltonoperator gewisse Funktionen auf, wie z.B.

$$\underline{B}_a^1(x) \cdot \underline{B}_b^1(x) \quad ,$$

die als Funktionen der x-Koordinaten gegeben sind.

Diese Koeffizienten sind aber stets drehinvariante Größen - in dem angeführten Beispiel sieht man das aus

$$\underline{B}_a^i \cdot \underline{B}_b^i = (\underline{e}_c \underline{B}_{ca}^i) \cdot (\underline{e}_f \underline{B}_{fb}^i) = \underline{B}_{ca}^i(q) \underline{B}_{cb}^i(q) \quad - \quad ,$$

so daß man in den Argumenten dieser Funktionen die x-Koordinaten durch die x'-Koordinaten (auf dem physikalischen Bereich) ersetzen kann, ohne die Funktionswerte zu verändern - hier also :

$$\underline{B}_a^i(x) \cdot \underline{B}_b^i(x) = \underline{B}_a^i(x') \cdot \underline{B}_b^i(x') \Big|_{p.B.} = \underline{B}_a^{i'} \cdot \underline{B}_b^{i'} \Big|_{p.B.} \quad (C, 28)$$

Wir kommen schließlich auf das folgende Ergebnis :

$$\begin{aligned} H \Psi^{JM} = & \left[\frac{1}{2m} \sum_i \underline{p}_i'^2 + V_{ww}(x') + \right. \\ & + \frac{1}{m} \left\{ \underline{B}_a^{i'} \cdot \underline{p}_i' + \frac{\hbar}{2i} \nabla_i' \underline{B}_a^{i'} \right\} (\underline{J}_a - j_a^{KF'}) + \\ & \left. + \frac{1}{2m} \underline{B}_a^{i'} \cdot \underline{B}_b^{i'} (\underline{J}_a - j_a^{KF'}) (\underline{J}_b - j_b^{KF'}) \right] \Phi_K^{JM}(x') \Big|_{p.B.} |JMK\rangle_\Omega \end{aligned} \quad (C, 29)$$

Der auf der rechten Seite in eckigen Klammern stehende Operator enthält jetzt nur noch Funktionen und Operatoren in x', die auf die Intrinsic-Funktionen $\Phi_K^{JM}(x')$ wirken, sowie die Drehimpulsoperatoren J_{α} , die auf die Kreiselfunktionen $|JMK\rangle_\Omega$ wirken.

Deshalb kann man hier die Einschränkung der x'-Koordinaten auf den physikalischen Bereich fallen lassen und damit den obigen Hamiltonoperator auf den gesamten x'-Raum ausdehnen.

Wir erhalten also zur Bestimmung der Intrinsic-Funktionen $\Phi_K^{\mathfrak{J} \text{ intr}}(x')$ das Eigenwertgleichungssystem

$$H_{KK'}^{\mathfrak{J} \text{ intr}} \Phi_{K'}^{\mathfrak{J} \text{ intr}} = E_{\mathfrak{J}} \Phi_K^{\mathfrak{J} \text{ intr}} \quad (C, 30)$$

Darin bedeutet $H^{\mathfrak{J} \text{ intr}}$ den nach Potenzen von J geordneten Matrixoperator

$$\begin{aligned} H_{KK'}^{\mathfrak{J} \text{ intr}}(x') &= H_o^{\text{intr}}(x') \delta_{KK'} + \mathcal{A}_a^{\text{intr}}(x') \langle \mathfrak{J} K | \mathfrak{J}_a | \mathfrak{J} K' \rangle \\ &+ \frac{1}{2} \Theta_{ab}^{\mathfrak{J} \text{ intr}}(x') \langle \mathfrak{J} K | \mathfrak{J}_a \mathfrak{J}_b | \mathfrak{J} K' \rangle \end{aligned} \quad (C, 31)$$

mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} H_o^{\text{intr}}(x') &= \frac{1}{2m} \sum_i p_i'^2 + V_{ww} - \frac{1}{m} \left(\underline{B}_a^{i'} \cdot p_i' + \frac{\hbar}{2i} \nabla_i' \underline{B}_a^{i'} \right) j_a^{KF'} \\ &+ \frac{1}{2m} \underline{B}_a^{i'} \cdot \underline{B}_b^{i'} j_a^{KF'} j_b^{KF'} \end{aligned} \quad (C, 32a)$$

$$\mathcal{A}_a^{\text{intr}}(x') = \frac{1}{m} \left(\underline{B}_a^{i'} \cdot p_i' + \frac{\hbar}{2i} \nabla_i' \underline{B}_a^{i'} \right) - \frac{1}{m} \underline{B}_a^{i'} \cdot \underline{B}_b^{i'} j_b^{KF'} \quad (C, 32b)$$

$$\Theta_{ab}^{\mathfrak{J} \text{ intr}}(x') = \frac{1}{m} \underline{B}_a^{i'} \cdot \underline{B}_b^{i'} \quad (C, 32c)$$

Die Bezeichnungen in (C,31) sind in Analogie zu denen in Abschnitt A.I.4 gewählt, wo die Eigenwertgleichung für die echten inneren Funktionen $\Phi_K^{\mathfrak{J}}(q)$ diskutiert wurde. (Der Zusammenhang mit den dort verwendeten Operatoren wird sich als sehr eng herausstellen.)

Wir können somit feststellen : Die Eigenwertgleichung (C,30) führt zu Intrinsic-Funktionen $\Phi_K^{\mathfrak{J} \text{ intr}}(x')$, die im gesamten x' -Raum definiert sind. Durch Einschränkung auf den physikalischen Bereich ergeben sich daraus die echten physikalischen Wellenfunktionen $\Psi^{\mathfrak{J}M}$ nach (C,13). Die Form von $H^{\mathfrak{J} \text{ intr}}$ hängt dabei, wie man aus (C,32) erkennt, von der verwendeten Definition des körperfesten

Systems ab. Zur Beschreibung von kollektiven Rotationsbanden wird es nötig sein, das innere Bezugssystem geeignet zu bestimmen.

Vorher wollen wir uns jedoch noch mit der Struktur der Eigenfunktionen von H^{intr} befassen.

4. Eigenfunktionen des Intrinsic-Hamiltonoperators

Wir wollen hier untersuchen, wie die Eigenfunktionen des Intrinsic-Hamiltonoperators (C,31) zusammenhängen mit denen des richtigen Hamiltonoperators (C,14). Die Koordinaten x' in (C,31) sind dabei unbeschränkt im $3N$ -dimensionalen x' -Raum. Also können wir sie vollkommen analog zu den raumfesten x -Koordinaten behandeln.

Wir führen deshalb, genau wie in Teil A für die x -Koordinaten, anstelle der x' -Werte Eulersche Winkel Ω' und innere Koordinaten q' folgendermaßen ein :

$$\Omega' = \Omega(x') \quad ; \quad q' = q(x') \quad (C,33)$$

Die Definitionen seien dabei dieselben wie bei den x -Koordinaten (Ersetzung der Argumente x durch x').

Diese Koordinaten kann man sich anhand der Abb.2 verdeutlichen : Auf der Hyperfläche des physikalischen Bereichs ist

$$\Omega'|_{p.B.} = \Omega(x')|_{p.B.} = 0 \quad , \quad (C,34)$$

für die drehinvarianten inneren Koordinaten gilt dort :

$$q'|_{p.B.} = q(x')|_{p.B.} = q \quad (C,35)$$

Die Parameter auf der Hyperfläche sind also die Koordinaten q' , während längs der eingezeichneten Trajektorien die Ω' -Werte variieren.

Mit Hilfe dieser neuen Koordinaten (q', Ω') wollen wir nun die einzelnen Teile des Intrinsic-Hamiltonoperators ausdrücken.

a) Transformation von H^{intr} auf q' und Ω'

Am einfachsten ist die Umrechnung des Trägheitstensors. Wir erhalten durch Verwendung von (C,32c) und (A,16c) :

$$\frac{1}{m} \underline{B}_a^{i'} \cdot \underline{B}_b^{i'} = \frac{1}{m} B_{ca}^{i'} B_{cb}^{i'} = \Theta_{ab}^{-i'} \quad , \quad (C,36)$$

also

$$\Theta_{ab}^{-i'} \text{intr}(x') = \Theta_{ab}^{-i'}(q') \quad (C,37)$$

D.h. der Trägheitstensor nach (C,32c) ist (als Funktion von q') durch den entsprechenden Ausdruck aus Teil A gegeben und enthält dann natürlich nicht mehr die Eulerischen Winkel Ω' .

Für die weiteren Terme in (C,32) benützen wir die Formel (A,7) für den Linearimpuls, die hier (in x' -Koordinaten) lautet :

$$p_i' = \varepsilon_a' F_{aj}^{i'} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j'} + \varepsilon_a' B_{ab}^{i'} j_b^{KF'} \quad (C,38)$$

So erhält man für den ersten Term in (C,32b) den Ausdruck (die Einzelheiten stehen in Anhang D.IX)

$$\begin{aligned} \frac{1}{m} (\underline{B}_a^{i'} \cdot p_i' + \frac{\hbar}{2i} \nabla_i' \underline{B}_a^{i'}) &= \\ &= \frac{\hbar}{2i} (A_{j,a}' \frac{\partial}{\partial q_j'} + G_a') + \Theta_{ab}^{-i'} j_b^{KF'} \\ &= \mathcal{A}_a(q') + \Theta_{ab}^{-i'}(q') j_b^{KF'} \end{aligned} \quad (C,39)$$

und natürlich auch für den ersten Teil von (C,32a) :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \sum_i p_i'^2 + V_{\text{pot}} &= \\ &= H_0(q') + \mathcal{A}_a(q') j_a^{KF'} + \frac{1}{2} \Theta_{ab}^{-i'}(q') j_a^{KF'} j_b^{KF'} \end{aligned} \quad (C,40)$$

Mit Hilfe dieser Ergebnisse sieht man dann, daß die Terme, die die körperfesten Drehimpulskomponenten $j_a^{KF'}$

enthalten, in (C,32) vollständig entfallen, so daß sich ergibt :

$$H_o^{intr}(x') = H_o(q') \quad (C,41a)$$

$$\mathcal{A}_a^{intr}(x') = \mathcal{A}_a(q') \quad (C,41b)$$

$$\Theta_{ab}^{-1 intr}(x') = \Theta_{ab}^{-1}(q') \quad (C,41c)$$

Wir erhalten also dieselben Anteile von $H^{\mathcal{F} intr}$ wie bei der J-Zerlegung des Hamiltonoperators in Teil A .

Damit können wir schreiben :

$$\begin{aligned} H_{KK'}^{\mathcal{F} intr} &= H_o(q') \delta_{KK'} + \mathcal{A}_a(q') \langle \mathcal{F}K | \mathcal{F}_a | \mathcal{F}K' \rangle \\ &+ \frac{1}{2} \Theta_{ab}^{-1}(q') \langle \mathcal{F}K | \mathcal{F}_a \mathcal{F}_b | \mathcal{F}K' \rangle \end{aligned} \quad (C,42)$$

Man sieht, daß die Operatoren (C,32) zwar durch alle x' -Koordinaten ausgedrückt sind, aber tatsächlich, wie die Transformation auf q' und Ω' ergibt, nur die inneren Koordinaten q' enthalten.

b) Struktur der Eigenfunktionen

Das Ergebnis (C,42) ermöglicht es, die Eigenfunktionen zu $H^{\mathcal{F} intr}$ anzugeben; denn dieser Ausdruck stimmt formal überein mit $H_{KK'}^J$ aus Formel (A,22). Nach Abschnitt A.I.4 liefert die Diagonalisierung von $H_{KK'}^J$ das System der inneren Funktionen $\Phi_K^{\mathcal{F}}(q)$. Bei der Übertragung auf $H_{KK'}^{\mathcal{F} intr}$ ist noch zu berücksichtigen, daß die Eigenfunktionen $\Phi_K^{\mathcal{F} intr}$ von allen x' -Koordinaten abhängen, sich also nach der Transformation auf q' und Ω' schreiben lassen als

$$\Phi_K^{\mathcal{F} intr} = \Phi_K^{\mathcal{F} intr}(q', \Omega') \quad (C,43)$$

Die Abhängigkeit von den Eulerschen Winkeln Ω' ist jedoch nur in diesen Wellenfunktionen vorhanden, nicht aber im zugehörigen Hamiltonoperator (C,42). Deshalb separiert diese Abhängigkeit von Ω' in der Wellenfunktion und wir erhalten durch Vergleich mit den Ergebnissen zu H_{KK}^J , für alle $K = -J, \dots, +J$:

$$\Phi_K^{\vec{J} \text{ intr}}(q', \Omega') = \Phi_K^{\vec{J}}(q') \cdot f(\Omega') \quad (\text{C}, 44)$$

Dabei ist $f(\Omega')$ eine beliebige Funktion der Eulerschen Winkel Ω' . Alle diese Lösungen für $\Phi_K^{\vec{J} \text{ intr}}$ haben die gleiche Energie E_J , unabhängig von der Funktion $f(\Omega')$. Folglich ist jedes Niveau von $H^{\vec{J} \text{ intr}}$ unendlich oft entartet, das gesamte Energiespektrum stimmt aber vollständig mit dem des echten Hamiltonoperators H überein.

Durch Übergang auf den physikalischen Bereich erhält man nun die richtigen physikalischen Wellenfunktionen. Wir errechnen also aus (C,44) :

$$\begin{aligned} \Phi_K^{\vec{J} \text{ intr}}(x) \big|_{p, \beta} &= \Phi_K^{\vec{J}}(q') f(\Omega') \big|_{p, \beta} = \Phi_K^{\vec{J}}(q) f(0) \\ &= \text{const. } \Phi_K^{\vec{J}}(q) \end{aligned} \quad (\text{C}, 45)$$

Daher ergibt sich für die Wellenfunktion nach (C,13) :

$$\Psi^{\vec{J}M}(q, \Omega) = \sum_K \Phi_K^{\vec{J}}(q) |^{\vec{J}MK}\rangle_{\Omega} \quad (\text{C}, 46)$$

Dies stimmt mit der Formel (C,10) überein und bestätigt noch einmal die Konsistenz der gegebenen Ableitung.

c) Deformierte Wellenfunktionen

Die zuletzt durchgeführten Überlegungen (Transformation auf q' und Ω') sind nicht dazu geeignet, die Intrinsic-Wellenfunktionen praktisch zu berechnen. Dazu muß man vielmehr wieder zurückgehen auf den Intrinsic-Hamiltonoperator, wie er durch (C,32) als Funktion der

x' -Koordinaten gegeben ist. Allerdings enthält $H^J \text{intr}$ noch unbestimmte Anteile in Form der Mitführungskoeffizienten. Deshalb muß man, etwa zur Bestimmung von Ψ_0^{intr} , praktisch folgendermaßen vorgehen :

Man gibt sich einen nicht allzu unrealistischen Grundzustand $\Psi_0^{\text{intr}}(x')$ vor. Für diesen Ausgangszustand bestimmt man das optimale körperfeste System durch spezifische Entkopplung. (Wie sich dieses Problem im vorliegenden Fall gestaltet, ist in Abschnitt III dieses Teils behandelt.) Mit den so erhaltenen Mitführungskoeffizienten kann man in H_0^{intr} eingehen und durch näherungsweise Lösung einen verbesserten Grundzustand gewinnen. Als Näherungsmethoden bieten sich dabei z. B. Hartree-Fock- oder Hartree-Fock-Bogolyubov-Rechnungen an. Durch iterative Fortsetzung dieses Verfahrens kann man dann hoffen, die endgültige Lösung dieses Selbstkonsistenz-Problems zu finden.

Für den ($J=0$)-Grundzustand erhielte man somit - bei hinreichend gutem Näherungsverfahren - nach Umrechnung auf q' und Ω' die Produktform

$$\Psi_0^{\text{intr}}(x') = \Psi_0(q') \cdot \phi(\Omega') \quad (C,47)$$

Folglich beschreibt Ψ_0^{intr} , solange sich nicht zufälligerweise für $f(\Omega')$ eine Konstante ergeben sollte, eine in den x' -Koordinaten nicht-drehinvariante, also deformierte Wellenfunktion.

Dieses Ergebnis liefert die Rechtfertigung dafür, deformierte Wellenfunktionen als Ausgangspunkt des Lösungsverfahrens anzusetzen, wie dies bei der Behandlung deformierter Kerne (vgl. z.B. [51]) üblicherweise ohne vertiefte Begründung getan wird.

Allerdings ging man bei solchen Rechnungen bisher stets von dem normalen Hamiltonoperator (in x' -Koordinaten)

$$H(x') = \frac{1}{2m} \sum_i p_i'^2 + V_{ww}(x') \quad (C,48)$$

aus. Unsere Überlegungen zeigen aber, daß zur Bestimmung z.B. des Grundzustands eigentlich $H_0^{inter}(x')$ nach (C,32a) verwendet werden müßte, ein Hamiltonoperator, der gegenüber (C,48) durch zusätzliche Glieder modifiziert ist.

Die in diesem Abschnitt dargestellte Theorie der intrinsisch-deformierten Wellenfunktionen ist die Grundlage für die Behandlung der kollektiven Rotationen. Bevor wir uns diesem Problem zuwenden, wollen wir jedoch noch in einem kurzen Abschnitt die vorstehenden Überlegungen mit der entsprechenden Theorie im Fall der Translation vergleichen.

II. Vergleich mit der Translation

Bekanntlich besteht zwischen der Rotation und der Translation eine weitgehende Analogie. Das Problem der kollektiven Translationen ist allerdings auf Grund der Galilei-Invarianz ohne Schwierigkeiten exakt lösbar.

1. Anwendung der Theorie der Intrinsic-Wellenfunktionen auf die Translation

a) Allgemeine Theorie

Als kollektive Koordinaten der Translation werden die Schwerpunktskoordinaten

$$Q = \frac{1}{N} \sum_i x_i \quad (C,49)$$

verwendet. Die restlichen Freiheitsgrade werden beschrieben durch translationsinvariante Koordinaten ξ_j ($j = 1, \dots, N-1$), unter denen wir uns beispielsweise Jacobi-Koordinaten vorstellen können.

Der Hamiltonoperator zerlegt sich dann in der Form

$$H = H_0(\xi) + \frac{1}{2M} P^2 \quad (C,50)$$

Dabei ist $P = \frac{h}{i} \partial / \partial Q$ der Gesamtimpuls des Systems.

Der Unterschied gegenüber der allgemeinen J-Zerlegung (A,14) besteht darin, daß keine Kopplungsglieder auftreten (unabhängig von der Wellenfunktion; deshalb ist die Entkopplung nicht nur spezifisch, sondern universell) und daß der Trägheitsparameter konstant ist (Gesamtmasse $M = N \cdot m$). Dies liegt an der Wahl des Schwerpunkts, der für die Translation das optimale Bezugssystem darstellt.

Die Wellenfunktionen zu festem Impuls P schreiben sich dann als

$$\Psi^p = \Psi^p(\xi, Q) = \Psi_0(\xi) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} P \cdot Q} \quad , \quad (C,51)$$

wobei die translationsinvarianten Wellenfunktionen $\Psi_0(\xi)$ Eigenfunktionen zu H_0 aus (C,50) sind.

b) Koordinaten, Intrinsic-Wellenfunktionen und
Intrinsic-Hamiltonoperator

In Analogie zu den körperfesten Teilchenkoordinaten (C,2) müssen wir hier die translationsinvarianten "schwerpunktsbezogenen" Teilchenkoordinaten

$$\underline{x}'_1 = \underline{x}_1 - Q(x) \quad (C,52)$$

benützen. Der (3N-3)-dimensionale physikalische Bereich ist, analog zu (C,6), charakterisiert durch

$$Q(x') = 0 \quad (C,53)$$

Zur Beschreibung der inneren Bewegung, die hier die Relativbewegung ist, diene die im vollen x' -Bereich definierte Intrinsic-Wellenfunktion

$$\Psi_0^{intr} = \Psi_0^{intr}(x') \quad , \quad (C,54)$$

unter der wir uns z.B. eine Schalenmodellwellenfunktion vorstellen können.

Der Übergang auf den physikalischen Bereich ergibt :

$$\Psi_0(\xi) = \Psi_0^{intr}(x')|_{p.B.} = \Psi_0^{intr}(\underline{x} - Q) \quad (C,55)$$

D.h. aus der räumlich lokalisierten (analog zur deformierten) Intrinsic-Funktion Ψ_0^{intr} gewinnt man durch Einsetzen von (C,52) die translationsinvariante physikalische Wellenfunktion Ψ_0 . Dieses Vorgehen ist äquivalent zu der Vorschrift von Gartenhaus und Schwartz [52]. Die Wellenfunktionen zum Impuls $\underline{P}$ schreiben sich als

$$\Psi^p(\xi, Q) = \Psi_0^{intr}(x')|_{p.B.} e^{\frac{i}{\hbar} P \cdot Q} \quad (C,56)$$

Deshalb gilt, wie eine elementare Rechnung zeigt :

$$p_i \Psi^P = \left[p'_i + \frac{1}{N} (\underline{P} - \underline{P}') \right] \Psi_0^{intr}(x') \Big|_{p.B.} e^{\frac{i}{\hbar} \underline{P} \cdot \underline{Q}}$$

und somit

$$H \Psi^P = \left[\frac{1}{2m} \sum_i p_i'^2 + V_{ww}(x') - \frac{1}{2M} \underline{P}^2 + \frac{1}{2M} \underline{P}^2 \right] \Psi_0^{intr}(x') \Big|_{p.B.} e^{\frac{i}{\hbar} \underline{P} \cdot \underline{Q}} \quad (C, 57)$$

Dabei ist $\underline{P}' = \sum_i \underline{p}'_i$ der Gesamtimpuls in x' -Koordinaten.

Durch Ausdehnung auf den vollen x' -Bereich ergibt sich dann die Eigenwertgleichung

$$H^{P intr} \Psi_0^{intr} = \left(H_0^{intr} + \frac{1}{2M} \underline{P}^2 \right) \Psi_0^{intr} = E_P \Psi_0^{intr} \quad (C, 58)$$

mit der Abkürzung

$$H_0^{intr} = \frac{1}{2m} \sum_i p_i'^2 + V_{ww} - \frac{1}{2M} \underline{P}^2 \quad (C, 59)$$

Die Wellenfunktion Ψ_0^{intr} bestimmt sich also als Eigenfunktion von H_0^{intr} nach (C, 59). Wegen des Zusatzgliedes in (C, 58) sind die Kollektivenergien von der Form

$$E_{trans}^P = \frac{1}{2M} \underline{P}^2 \quad (C, 60)$$

mit der (im Gegensatz zur Rotation) bekannten Masse M.

Der Operator $H_0^{intr}(x')$ enthält nun aber, wie man durch Transformation auf Jacobi-Koordinaten ξ' und Schwerpunktskoordinaten Q' sieht, die letzteren überhaupt nicht, also :

$$H_0^{intr}(x') = H_0(\xi') \quad (C, 61)$$

Deshalb sind die exakten Lösungen für $\Psi_0^{intr}(x')$ von der Form :

$$\Psi_0^{intr}(x') = \Psi_0(\xi') \cdot f(Q') \quad (C,62)$$

Die Abhängigkeit von den kollektiven Koordinaten Q' über die Funktion $f(Q')$ ist ganz willkürlich, durch H_0^{intr} wird nur die Wellenfunktion $\Psi_0(\xi')$ der inneren Bewegung festgelegt.

Die Funktion $f(Q')$ ist offensichtlich für die schon bei (C,55) erwähnte Lokalisierung der Wellenfunktionen verantwortlich.

2. Vergleich von Rotation und Translation

Die Zusammenstellung der Ergebnisse für die Translation und der Vergleich mit dem Fall der Rotation ist in Tab. 1 durchgeführt.

Der Hauptunterschied zwischen Rotation und Translation besteht darin, daß bei der Translation durch Verwendung des Schwerpunkts die Kopplung zwischen innerer und kollektiver Bewegung völlig entfällt. Daneben macht sich noch bemerkbar, daß die Translationsgruppe abelsch ist, was dazu führt, daß nur eine innere Funktion Ψ_0^{intr} auftritt, im Gegensatz zur Drehgruppe, deren irreduzible Darstellungen nicht eindimensional sind, was für $J \neq 0$ die Verwendung von mehreren inneren Funktionen Φ_k^{intr} nötig macht.

Ansonsten erkennt man aber aus Tab.1 die völlige Analogie zwischen den beiden Fällen.

Bei der Translation sieht man, daß der Intrinsic-Hamiltonoperator H_0^{intr} , der zur Bestimmung des impulsfreien Zustandes Ψ_0^{intr} dient, aus dem üblichen Hamiltonoperator $H = H(x')$ durch Subtraktion der Translationsenergie

$$E_{trans} = \frac{1}{2M} p'^2 \quad (C,63)$$

	Translation	Rotation
Körperfeste Koordinaten	$\underline{x}'_i = \underline{x}_i - \underline{Q}(x)$	$x'_i = x_i - \underline{Q}_a(x)$
Physikalischer Bereich	$\underline{Q}(x') = 0$	$\underline{\Omega}(x') = 0$
Wellenfunktionen	$\Psi^P = \Psi_0^{intr}(x') _{p.B.} e^{\frac{i}{\hbar} P \cdot Q}$	$\Psi^{\mathcal{M}} = \sum_K \Phi_K^{intr}(x') _{p.B.} \mathcal{M}K\rangle_{\underline{\Omega}}$
Intrinsic-Hamilton-operator	$H^{P\ intr} = H_0^{intr}(x') + \frac{1}{2M} \underline{P}^2$	$H_{KK'}^{intr} = H_0^{intr}(x') \delta_{KK'} + \phi_a^{intr}(x') \langle \mathcal{M}K \mathcal{F}_a \mathcal{M}K' \rangle + \frac{1}{2} \Theta_{ab}^{intr}(x') \langle \mathcal{M}K \mathcal{F}_a \mathcal{F}_b \mathcal{M}K' \rangle$
Intrinsic-Operator für den Grundzustand	$H_0^{intr} = \frac{1}{2m} \sum_i p_i'^2 + V_{nn} - \frac{1}{2M} \underline{P}^2 = H_0(\xi')$	$H_0^{intr} = \frac{1}{2m} \sum_i p_i'^2 + V_{nn} - \frac{1}{m} (\underline{B}_a^{Li} p_i' + \frac{\hbar}{2i} \nabla_i^{Li}) \cdot \underline{B}_a^{KF} + \frac{1}{2m} \underline{B}_a^{Li} \cdot \underline{B}_b^{Li} \cdot \underline{B}_b^{KF} \cdot \underline{B}_a^{KF} = H_0(q')$
Lösungen von H_0^{intr}	$\Psi_0^{intr}(x') = \Psi_0(\xi') f(Q')$	$\Psi_0^{intr}(x') = \Psi_0(q') f(\underline{\Omega}')$
Übergang auf den physik. Bereich	$f(Q') _{p.B.} = f(0) = const.$	$f(\underline{\Omega}') _{p.B.} = f(0) = const.$

Tab.1 : Vergleich zwischen Translation und Rotation

entsteht, so daß er effektiv nur noch innere Koordinaten q' enthält.

Analog dazu läßt sich dann im Fall der Rotation die Bildung des Intrinsic-Hamiltonoperators H_0^{intr} so interpretieren, daß vom üblichen Hamiltonoperator (C, 48) $H = H(x')$ gewisse Glieder abgezogen werden, die die Rotationsenergie bedeuten, so daß in H_0^{intr} effektiv nur noch die inneren Koordinaten q' vorkommen.

Es wäre also auch möglich gewesen, den Hamiltonoperator H_0^{intr} für die innere Bewegung (und entsprechend bei der Erweiterung auf H_3^{intr}) durch die Forderung zu bestimmen, daß dieser Operator nur noch innere Koordinaten enthält. Der Gedanke, ein H^{intr} aus dem ursprünglichen H in der Weise zu gewinnen, daß man gewisse Glieder, die die Rotationsenergie darstellen, subtrahiert, stammt schon von Lipkin, der dies für den Fall der zweidimensionalen Rotation formuliert hat [53, 54] . (Der realistischere Fall der dreidimensionalen Rotation ist von Villars [55] behandelt worden.) Allerdings ergibt sich dann ein Intrinsic-Hamiltonoperator in raumfesten x -Koordinaten, so daß es schwierig ist, dessen deformierte Eigenfunktionen richtig zu interpretieren oder gar daraus die echten Wellenfunktionen zu gewinnen. Im Gegensatz dazu ist dies bei unserer Methode möglich, da wir mit körperfesten x' -Koordinaten arbeiten und so der Intrinsic-Hamiltonoperator in den x' -Koordinaten gegeben ist.

III. Behandlung der kollektiven Rotationen

Die Überlegungen der vorhergehenden Abschnitte haben uns zu der Möglichkeit geführt, deformierte Wellenfunktionen durch Intrinsic-Wellenfunktionen zu beschreiben. Dies ist die Grundlage für die Anwendung der allgemeinen Betrachtungen aus Teil A, wo ein deformierter Ausgangszustand, ausgedrückt in echten inneren Koordinaten, vorausgesetzt wird. Im nächsten Punkt soll gezeigt werden, wie sich die Überlegungen zur optimalen Wahl eines körperfesten Systems aus Teil A darstellen bei Verwendung von Intrinsic-Wellenfunktionen.

1. Extremalprinzip der spezifischen Entkopplung mit Intrinsic-Wellenfunktionen

Im Fall der spezifischen Entkopplung haben die Wellenfunktionen einer Rotationsbande die Gestalt

$$\Psi^{\vec{M}} = \Psi_0 \cdot \sum_K c_K^{\vec{M}} |\vec{M} K\rangle \quad (C,64)$$

Dies besagt für die durch (A,19) definierten inneren Funktionen $\Phi_K^{\vec{M}}$:

$$\Phi_K^{\vec{M}}(q) = c_K^{\vec{M}} \cdot \Psi_0(q) \quad (C,65)$$

Diese Eigenschaft läßt sich entsprechend durch Intrinsic-Funktionen ausdrücken :

$$\Phi_K^{\vec{M} \text{ intr}}(x') = c_K^{\vec{M}} \cdot \Psi_0^{\text{intr}}(x') \quad (C,66)$$

Dabei betrachten wir die Grundzustandsfunktion $\Psi_0^{\text{intr}}(x')$ als gegeben, nämlich als Eigenfunktion von H_0^{intr} nach (C,32a) mit dem Eigenwert E_0 .

Die durch (C,66) definierten Wellenfunktionen einer Rotationsbande ergeben dann mit dem Intrinsic-Hamiltonoperator (C,31) die Erwartungswerte $E_J = E_0 + \epsilon_J$ mit

den Rotationsenergien

$$\mathcal{E}_J = \frac{1}{2} \langle \Psi_0^{intr} | \Theta_{ab}^{-1} | \Psi_0^{intr} \rangle \langle JK | \mathcal{I}_a \mathcal{I}_b | JK' \rangle c_K^{J*} c_K^J \quad (C, 67)$$

Der Unterschied gegenüber der entsprechenden Beziehung (A, 39) besteht darin, daß in Formel (C, 67) die Matrixelemente des Trägheitstensors durch Integration über den gesamten x' -Raum gebildet werden, während dort die Integration über die q -Koordinaten erfolgte. Die beiden Erwartungswerte in (A, 39) und (C, 67) stimmen aber überein, wenn Ψ_0^{intr} die exakte Lösung zu H_0^{intr} ist oder zumindest nahe an die richtige Eigenfunktion herankommt. Denn dann gilt die Formel (C, 47)

$$\Psi_0^{intr}(x') = \Psi_0(q') \cdot f(\Omega')$$

und daher ergibt sich, bei Verwendung der Beziehung (C, 41c) für Θ_{ab}^{-1} :

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0^{intr}(x') | \Theta_{ab}^{-1}(x') | \Psi_0^{intr}(x') \rangle &= \\ &= \langle \Psi_0(q') | \Theta_{ab}^{-1}(q') | \Psi_0(q') \rangle \langle f(\Omega') | f(\Omega') \rangle = \langle \Psi_0 | \Theta_{ab}^{-1} | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (C, 68)$$

Deshalb läßt sich das Extremalprinzip der spezifischen Entkopplung aus Teil A durch die Intrinsic-Wellenfunktion Ψ_0^{intr} und den Intrinsic-Operator Θ_{ab}^{-1} ausdrücken und lautet mit Hilfe von $\mathcal{E}_J$ aus (C, 67) :

$$\mathcal{E}_J(\text{Def.d.körperf.Syst.}; c_K^J) = \text{Min.}! \quad (C, 69)$$

Der Vorteil dieser Formulierung liegt darin, daß in den vorkommenden Intrinsic-Größen mit unabhängigen x' -Koordinaten gerechnet werden kann, was erst die weitere Behandlung ermöglicht.

2. Spezialisierung auf (K=0)-Banden

Ein wichtiger Spezialfall ist der Fall der Axial-symmetrie. Diese Voraussetzung können wir mit Hilfe der Intrinsic-Wellenfunktion Ψ_o^{intr} bequem ausdrücken, nämlich durch

$$j_3' \Psi_o^{intr} = 0 \quad (C,70)$$

Die auf diesem Zustand sich aufbauende Rotationsbande ist dann eine (K=0)-Bande, es gilt also :

$$\Phi_K^{j intr} = \delta_{K0} \cdot \Psi_o^{intr} \quad (C,71)$$

Dies führt, wie in Abschnitt A.III.3 gezeigt wurde, auf das jetzt in Intrinsic-Koordinaten formulierte Extremalprinzip :

$$\Theta_{eff}^{-1} = \frac{1}{2} \langle \Psi_o^{intr} | \Theta_{11}^{-1 intr} + \Theta_{22}^{-1 intr} | \Psi_o^{intr} \rangle = Min. ! \quad (C,72)$$

Die im Trägheitstensor $\Theta_{ab}^{-1 intr}$ vorkommenden Mitführungskoeffizienten $\underline{B}_a^{1'}$ lassen sich wiederum durch die Eulerschen Winkel (α, β, γ) ausdrücken (vgl. Anhang D.V), die als Funktionen von x' die Lage des optimalen inneren Systems relativ zur Symmetrieachse der Intrinsic-Wellenfunktion bestimmen. Es ergibt sich :

$$\frac{1}{\Theta_{eff}} = \int \frac{1}{2m} \sum_i [\sin^2 \beta (\underline{V}_i' \alpha)^2 + (\underline{V}_i' \beta)^2] \Psi_o^{intr 2}(x') dx' = Min. ! \quad (C,73)$$

Zu diesem Extremalprinzip treten noch die in Formel (A,1) gegebenen Mitdrehbedingungen des körperfesten Systems hinzu, die in der jetzigen Bezeichnungsweise folgendermaßen lauten :

$$[j_b', e_{ac}(x')] = i \hbar \epsilon_{bcf} e_{af}(x') \quad (C,74)$$

Von diesen Nebenbedingungen benötigen wir hier nur diejenigen für die Eulerschen Winkel $\alpha(x')$ und $\beta(x')$, da in (C,73) der Winkel γ nicht vorkommt.

D.h. wir brauchen die Mitdrehbedingungen für den Einheitsvektor $\underline{e}_3 = (\sin\beta\cos\alpha, \sin\beta\sin\alpha, \cos\beta)$, der die Richtung der körperfesten 3-Achse angibt, von denen es - wegen $\underline{e}_3^2 = 1$ - ausreicht, diejenigen für die Komponenten e_{31} und e_{32} zu formulieren :

$$\begin{array}{l|l} \frac{i}{\hbar} j_1'(\sin\beta\cos\alpha) = 0 & \frac{i}{\hbar} j_1'(\sin\beta\sin\alpha) = -\cos\beta \\ \frac{i}{\hbar} j_2'(\sin\beta\cos\alpha) = \cos\beta & \frac{i}{\hbar} j_2'(\sin\beta\sin\alpha) = 0 \\ \frac{i}{\hbar} j_3'(\sin\beta\cos\alpha) = -\sin\beta\sin\alpha & \frac{i}{\hbar} j_3'(\sin\beta\sin\alpha) = \sin\beta\cos\alpha \end{array} \quad (C,75)$$

Die Problemstellung lautet also : Man bestimme $\alpha = \alpha(x')$ und $\beta = \beta(x')$ so, daß das Funktional (C,73) unter Berücksichtigung der Mitdrehbedingungen (C,75) extremal wird. Die Lösung liefert dann das richtige, zur Wellenfunktion ψ_0^{intr} gehörige Trägheitsmoment Θ_{eff} .

Im allgemeinen ist dies ein recht kompliziertes Problem. Allerdings kann man in dem physikalisch sehr wichtigen Fall, daß ψ_0^{intr} einen stark deformierten Zustand beschreibt, bis zur allgemeinen Lösung des Problems kommen, was wir im folgenden zeigen wollen.

a) Näherungen im Fall starker Deformation

Wir setzen jetzt voraus, daß die Wellenfunktion stark deformiert ist. Genauer gesagt, wir benötigen die Forderung, daß der Erwartungswert von j'^2 sehr groß ist, also :

$$\frac{1}{\hbar^2} \langle \psi_0^{intr} | j'^2 | \psi_0^{intr} \rangle \gg 1 \quad (C,76)$$

Um uns klarzumachen, wie diese Aussage mit dem geometrisch definierten Deformationsparameter zusammenhängt, machen wir für ψ_0^{intr} eine einfache Modellannahme :

Die Wellenfunktion Ψ_0^{intr} beschreibe unabhängige Teilchen in einem axialsymmetrisch deformierten Oszillatorpotential mit den Frequenzen $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ in Richtung der drei Achsen, wobei $\omega_3 < \omega_1 = \omega_2$ gelte.

Wie aus Anhang D.X zu entnehmen ist, erhält man dann im Fall von Fermionen für den Grundzustand (Auffüllen aller Niveaus von unten) den Erwartungswert

$$\frac{1}{\hbar^2} \langle j^{12} \rangle = N_3 \frac{\omega_1^2 - \omega_3^2}{\omega_1 \omega_3} \approx 2 N_3 \cdot \delta \quad , \quad (C,77)$$

wobei δ der Deformationsparameter ist und

$$N_3 = \sum_{i \text{ besetzt}} (n_{3i} + \frac{1}{2})$$

mit der Anzahl der Teilchen zusammenhängt.

Die Forderung (C,76) nach starker Deformation bedeutet also das Vorliegen von großer Teilchenzahl und nicht zu kleinem Deformationsparameter δ . Dies ist im Bereich der seltenen Erden und der Aktiniden recht gut erfüllt, allerdings nicht im Bereich leichterer Kerne, etwa in der sd-Schale, wo trotz großer Deformation δ die Teilchenzahl nicht groß genug ist.

Unter der Voraussetzung (C,76) können wir jetzt zwei Näherungen einführen, die zu einer wesentlichen Vereinfachung des Variationsproblems führen - die Begründung dieser Näherungen anhand der Lösung verschieben wir auf Punkt 4 dieses Abschnitts - :

- (i) Der Winkel $\beta = \beta(x')$ ist klein, und zwar überall dort, wo die Wellenfunktion $\Psi_0^{intr}(x')$ wesentlich von Null verschieden ist, d.h. es gilt für die schließlich gefundene Lösung des Extremalprinzips :

$$\langle \Psi_0^{intr} | \beta^2 | \Psi_0^{intr} \rangle \ll 1 \quad (C,78)$$

Die der x' -Punktkonfiguration zugeordnete 3-Achse weicht also nur wenig von der Symmetrieachse der Intrinsic-Wellenfunktion ab.

- (ii) Wir berücksichtigen bei den Nebenbedingungen (C,75) nur die Erwartungswerte, gebildet mit Ψ_0^{intr} ; d.h. die Mitdrehbedingungen werden nur im Mittel mitgenommen. Durch diese Einschränkung der Nebenbedingungen erweitert sich der Bereich der zugelassenen Funktionen $\alpha(x')$ und $\beta(x')$. Dies ist aber dann gerechtfertigt, wenn für die gefundene Minimallösung nachträglich geprüft wird, daß sämtliche Nebenbedingungen vollständig erfüllt sind.

Mit Hilfe dieser beiden Näherungen läßt sich das Variationsproblem (C,73) unter Benutzung der Abkürzungen

$$\begin{aligned} S_1(x') &= -\beta \sin \alpha \\ S_2(x') &= \beta \cos \alpha \end{aligned} \quad (C,79)$$

im Fall starker Deformation wie folgt formulieren :

$$\frac{1}{\Theta_{eff}} = \langle \Psi_0^{intr} | \frac{1}{2m} \sum_i [(\nabla_i' S_1)^2 + (\nabla_i' S_2)^2] | \Psi_0^{intr} \rangle = \text{Min.}! \quad (C,80)$$

Die gemittelten Nebenbedingungen (die Erwartungswerte sind stets mit Ψ_0^{intr} zu bilden) lauten :

$$\begin{aligned} \langle \frac{i}{\hbar} j_1' S_1 \rangle &= 1 \quad ; \quad \langle \frac{i}{\hbar} j_1' S_2 \rangle = 0 \\ \langle \frac{i}{\hbar} j_2' S_1 \rangle &= 0 \quad ; \quad \langle \frac{i}{\hbar} j_2' S_2 \rangle = 1 \end{aligned} \quad (C,81)$$

sowie

$$\langle \frac{i}{\hbar} j_3' S_1 \rangle = -\langle S_2 \rangle \quad ; \quad \langle \frac{i}{\hbar} j_3' S_2 \rangle = \langle S_1 \rangle \quad (C,82)$$

Weil nach (C,70) Ψ_0^{intr} axialsymmetrisch ist, gilt

$$\langle \frac{i}{\hbar} j_3' S_2 \rangle = \langle 0 | \frac{i}{\hbar} [j_3', S_2] | 0 \rangle = 0 \quad ,$$

so daß sich (C,82) zu

$$\langle S_1 \rangle = 0 \quad ; \quad \langle S_2 \rangle = 0 \quad (C,83)$$

vereinfachen läßt.

Die jetzige Form des Extremalprinzips (Formulierung mit S_1 und S_2) zeigt eine enge formale Verwandtschaft mit dem Extremalproblem (B,35), das beim Rotor + Particle - Modell auftrat. Unter Ausnützung der dortigen Ergebnisse können wir uns nun der Lösung zuwenden.

b) Lösung des Extremalproblems

Die Variation des Funktional (C,80) ist durchzuführen unter Verwendung von Lagrangeparametern λ_{ab} ($a, b = 1, 2$) und μ_a ($a = 1, 2$), die zu den Nebenbedingungen (C,81) bzw. (C,83) gehören. Dies liefert die Eulerschen Gleichungen für S_1 und S_2 :

$$\begin{aligned} \frac{1}{m} \nabla_i' (\psi_0^{intr2} \nabla_i' S_1) &= \lambda_{11} \frac{i}{\hbar} j_i' (\psi_0^{intr2}) + \lambda_{21} \frac{i}{\hbar} j_i' (\psi_0^{intr2}) \\ &+ \mu_1 \psi_0^{intr2} \end{aligned} \quad (C,84)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{m} \nabla_i' (\psi_0^{intr2} \nabla_i' S_2) &= \lambda_{12} \frac{i}{\hbar} j_i' (\psi_0^{intr2}) + \lambda_{22} \frac{i}{\hbar} j_i' (\psi_0^{intr2}) \\ &+ \mu_2 \psi_0^{intr2} \end{aligned}$$

Diese Gleichungen werden nun, ebenso wie (B,36), gelöst durch den Entwicklungsansatz (vgl. (B,42))

$$S_{1,2} \psi_0^{intr} = \sum_n a_n^{(1,2)} \psi_n^{intr} \quad (C,85)$$

Die Wellenfunktionen $\psi_n^{intr}(x')$ sind für $n \neq 0$ die angeregten Zustände zur Ausgangsfunktion ψ_0^{intr} . Zu ihrer Bestimmung verwenden wir die Tatsache, daß dem deformierten Zustand ψ_0^{intr} über die Eigenwertgleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i' + V_{def} \right) \psi_0^{intr} = E_0 \psi_0^{intr} \quad (C,86)$$

ein lokales, deformiertes Potential $V_{def}(x')$ zugeordnet ist. Es gilt dann also :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i' + V_{def} \right) \psi_n^{intr} = E_n \psi_n^{intr} \quad (C,87)$$

Unter Verwendung dieser Eigenwertgleichungen können wir, analog wie in Abschnitt B.II.4, die linken Seiten der Variationsgleichungen (C,84) berechnen.

Wir erhalten (für $a = 1, 2$) :

$$\begin{aligned} & -\frac{2}{\hbar^2} \sum_n a_n^{(a)} (E_n - E_0) \psi_n^{\text{intr}} \psi_0^{\text{intr}} = \\ & = 2 \sum_{b=1,2} \lambda_{ba} \psi_0^{\text{intr}} \frac{i}{\hbar} j_b'(\psi_0^{\text{intr}}) + \mu_a \psi_0^{\text{intr}^2} \end{aligned}$$

Daraus erkennt man durch Integration über die Koordinaten $\vec{x}'$, daß wegen $\langle 0 | j_a' | 0 \rangle = 0$

$$\mu_1 = \mu_2 = 0 \quad (\text{C,88})$$

gilt.

Weiterhin lassen sich die Entwicklungskoeffizienten $a_n^{(1,2)}$ für $n \neq 0$ angeben :

$$a_n^{(a)} = \frac{\hbar}{i} \sum_{b=1,2} \lambda_{ba} \frac{\langle n | j_b' | 0 \rangle}{E_n - E_0} \quad (a=1,2), \quad (\text{C,89})$$

wobei die Matrixelemente wieder mit den Intrinsic-Wellenfunktionen zu bilden sind.

Die Koeffizienten $a_0^{(1)}$ und $a_0^{(2)}$ bleiben durch die Gleichungen (C,84) unbestimmt. Sie ergeben sich aus den Nebenbedingungen (C,83) zu

$$a_0^{(1)} = a_0^{(2)} = 0 \quad (\text{C,90})$$

Zu bestimmen sind jetzt noch die Lagrangeparameter λ_{ba} , und zwar mit Hilfe der Nebenbedingungen (C,81), die zusammengefaßt lauten :

$$\left\langle \frac{i}{\hbar} j_a' S_b \right\rangle = \delta_{ab} \quad (a, b = 1, 2) \quad (\text{C,91})$$

Durch Einsetzen von (C,85) und (C,89) in die letzte Beziehung ergibt sich nach elementarer Rechnung :

$$\sum_{c=1,2} \left(2 \sum_{n \neq 0} \frac{\langle 0 | j_a' | n \rangle \langle n | j_c' | 0 \rangle}{E_n - E_0} \right) \lambda_{cb} = \delta_{ab} \quad (\text{C,92})$$

Mit der Abkürzung

$$\Theta_{cr} = 2 \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n | j'_1 | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0} = 2 \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n | j'_2 | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0} \quad (C, 93)$$

für das Cranking-Trägheitsmoment erhalten wir daraus
(vgl. Anhang D.VI) :

$$\lambda_{11} = \lambda_{22} = \frac{1}{\Theta_{cr}} \quad , \quad \lambda_{12} = \lambda_{21} = 0 \quad , \quad (C, 94)$$

also kurz

$$\lambda_{ab} = \frac{1}{\Theta_{cr}} \delta_{ab} \quad (a, b = 1, 2) \quad (C, 95)$$

Die Lösung für S_1 und S_2 ist damit vollständig bestimmt
und schreibt sich in der Form ($a = 1, 2$) :

$$S_a(x') \psi_0^{intr}(x') = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\Theta_{cr}} \sum_{n \neq 0} \frac{\langle n | j'_a | 0 \rangle}{E_n - E_0} \psi_n^{intr}(x') \quad (C, 96)$$

Das optimale körperfeste System (genauer: die 3-Achse)
ist jetzt also festgelegt durch die Gleichungen

$$S_1(x') = 0 \quad ; \quad S_2(x') = 0 \quad (C, 97)$$

Schließlich lassen sich zur Berechnung von Θ_{eff} die in
(C,80) eingehenden Matrixelemente in Analogie zu (B,45)
unter Verwendung der Variationsgleichungen folgender-
maßen ausdrücken :

$$\langle 0 | \frac{1}{m} \sum_i (\nabla_i S_i)^2 | 0 \rangle = \frac{1}{\Theta_{cr}} \langle 0 | \frac{1}{\hbar} j_2 S_2 | 0 \rangle = \frac{1}{\Theta_{cr}} \quad (C, 98)$$

Daraus entnehmen wir sofort den Wert des Funktionals
(C,80) zu $\frac{1}{\Theta_{cr}}$, was für das effektive Trägheitsmoment
bedeutet :

$$\Theta_{eff} = \Theta_{cr} = 2 \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n | j'_1 | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0} \quad (C, 99)$$

Es ergibt sich also, daß im Fall starker Deformation das effektive Trägheitsmoment von ($K=0$)-Banden durch die Cranking-Formel gegeben ist. Die Anwendung dieser ursprünglich auf halbklassischem Weg gewonnenen Formel ist durch unsere voll quantenmechanische Ableitung auf eine sichere Grundlage gestellt. Die Bedeutung der eingehenden Wellenfunktionen Ψ_0^{intr} bzw. Ψ_n^{intr} als Intrinsic-Wellenfunktionen ist dabei ganz zwangsläufig.

Die Größe des Trägheitsmoments hängt natürlich wesentlich von der Struktur von Ψ_0^{intr} ab. In welchem Maß hier Übereinstimmung mit den experimentellen Werten für die Trägheitsmomente erzielt wird, ist dadurch bestimmt, wie genau der Ausgangszustand Ψ_0^{intr} als Lösung zu H_0^{intr} zu finden ist. Da die Cranking-Formel mit Paarung nun bereits eine recht gute Übereinstimmung mit dem Experiment liefert [41,42], ist offensichtlich - für stark deformierte gg-Kerne im Bereich der seltenen Erden und der Aktiniden - die Beschreibung von Ψ_0^{intr} durch unabhängige Teilchen mit Paarung eine recht gute Annäherung an die Wirklichkeit.

3. Allgemeiner Fall : asymmetrischer Kreisel

In diesem Abschnitt sollen die vorhergehenden Überlegungen erweitert werden auf nicht-axialsymmetrische Systeme, also Fälle, bei denen die Bedingung (C,70) der Axialsymmetrie für Ψ_o^{intr} nicht vorliegt.

Das Extremalprinzip, das zur spezifischen Entkopplung für einen einzelnen Rotationszustand führt, lautet :

$$\epsilon_{\vec{J}} = \frac{1}{2} \langle \Theta_{ab}^{-1 intr} \rangle \cdot i_{ab}^{(\vec{J})} = Min. ! \quad (C,100)$$

mit der Abkürzung (vgl. (C,67))

$$i_{ab}^{(\vec{J})} = \langle \vec{J} K | \frac{1}{2} (\vec{J}_a \vec{J}_b + \vec{J}_b \vec{J}_a) | \vec{J} K' \rangle c_K^{\vec{J}*} c_{K'}^{\vec{J}} \quad (C,101)$$

Der in Teil A diskutierte Fall der gleichzeitigen Behandlung des gesamten Rotationsmultipletts, der zur Forderung führt, den Energieschwerpunkt dieses Multipletts nach (A,47) zu minimalisieren, läßt sich ebenfalls durch die Formel (C,100) beschreiben, wenn man dann unter der Matrix $i_{ab}^{(\vec{J})}$ den Ausdruck

$$i_{ab}^{(\vec{J})} = \frac{1}{3} \vec{J}(\vec{J}+1) \hbar^2 \cdot \delta_{ab} \quad (C,102)$$

versteht.

Im Fall der Formel (C,101) müssen wir uns zunächst einen Satz von Koeffizienten c_K^J vorgeben und damit aus dem Extremalprinzip (C,100) ein körperfestes System bestimmen. Für dieses innere System sind dann die Koeffizienten c_K^J aus der Kreiselgleichung (A,51) zu errechnen, wodurch das Verfahren auf seine Konsistenz geprüft werden kann.

Der letzte Schritt erübrigt sich allerdings im Fall starker Deformation, der im folgenden behandelt wird und für den sich die Lösung des Variationsproblems vollständig durchführen läßt.

In dem hier vorliegenden triaxialen Fall setzen wir starke Deformation in allen drei Achsenrichtungen voraus, also für $a = 1, 2, 3$

$$\frac{1}{4^2} \langle \Psi_0^{intr} | j_a'^2 | \Psi_0^{intr} \rangle \gg 1 \quad (C, 103)$$

Die daraus sich ergebenden Näherungsmöglichkeiten sind den früheren analog (Begründung unter Punkt 4) :

- (i) Die Abweichungen der körperfesten Einheitsvektoren $\underline{e}_a(x')$ von der Einheitsform $e_{ab} = \delta_{ab}$ sind klein, und zwar dort, wo $\Psi_0^{intr}(x')$ wesentlich von Null verschieden ist, d.h. wir können - unter Integralen der Form $\int \dots \Psi_0^{intr 2}(x') dx'$ - schreiben :

$$e_{ab}(x') \approx \delta_{ab} + \varepsilon_{abc} S_c(x') \quad (C, 104)$$

mit

$$\langle \Psi_0^{intr} | S_c^2 | \Psi_0^{intr} \rangle \ll 1 \quad (C, 105)$$

Die Größen $S_c(x')$ ($c = 1, 2, 3$) bestimmen also jetzt anstelle der $\underline{e}_a(x')$ die Definition des körperfesten Systems.

- (ii) Die Nebenbedingungen (C,74) werden wiederum nur im Mittel (Erwartungswerte mit Ψ_0^{intr}) mitgenommen. Die Rechtfertigung dafür ist dieselbe wie früher.

Mit diesen beiden Feststellungen läßt sich dann das Extremalproblem (C,100) wesentlich vereinfachen. Die in $\Theta_{ab}^{-1 intr}$ vorkommenden Mitführungskoeffizienten $\underline{B}_a^{i'}$ errechnen sich aus den Formeln (A,10) und (C,18) mit der Näherung (C,104) zu

$$\underline{B}_a^i(x') \approx \underline{V}_i' S_a \quad (C, 106)$$

so daß wir für das Funktional (C,100) schreiben können :

$$\varepsilon_3 = \frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{m} \sum_i \langle \underline{V}_i' S_a \rangle \langle \underline{V}_i' S_b \rangle \right\rangle \cdot i_{ab}^{(3)} = Min. ! \quad (C, 107)$$

Für die Formulierung der Nebenbedingungen verwenden wir ebenfalls die "Kleinwinkelnäherung" (C,105) und erhalten dann aus den gemittelten Beziehungen (C,74) :

$$\left\langle \frac{i}{\hbar} j'_b S_a \right\rangle = \delta_{ab} \quad (C,108)$$

Damit haben wir das Extremalprinzip zur Bestimmung des optimalen körperfesten Systems zurückgeführt auf das Variationsproblem (C,107) für die Größen $S_a(x')$ mit den Nebenbedingungen (C,108).

Das weitere Vorgehen ist analog zum axialsymmetrischen Fall. Die zugehörigen Eulerschen Gleichungen lauten bei Einführung der Lagrangeparameter $\tilde{\lambda}_{ba}$:

$$i_{ab}^{(3)} \cdot \frac{1}{m} \nabla_i' (\psi_o^{intr2} \nabla_i' S_b) = \tilde{\lambda}_{ba} \frac{i}{\hbar} j'_b (\psi_o^{intr2}) \quad (C,109)$$

Falls die Matrix $i_{ab}^{(3)}$ invertierbar ist, folgt mit Hilfe der neuen Lagrangeparameter $\lambda_{ba} = \tilde{\lambda}_{ba} (i^{(3)})^{-1}_{ca}$ die Variationsgleichung

$$\frac{1}{m} \nabla_i' (\psi_o^{intr2} \nabla_i' S_a) = \lambda_{ba} \frac{i}{\hbar} j'_b (\psi_o^{intr2}) \quad (C,110)$$

Die reelle symmetrische Matrix $i_{ab}^{(3)}$ ist nicht-singulär, also invertierbar, wenn die quadratische Form

$$I(\underline{n}) = i_{ab}^{(3)} n_a n_b \quad (C,111)$$

echt positiv definit ist. Dies läßt sich mit (C,101) folgendermaßen ausdrücken :

$$I(\underline{n}) = c_K^{3*} \langle \mathcal{K} | (n_a \mathcal{J}_a)^2 | \mathcal{K}' \rangle c_K^3 > 0 \quad (C,112)$$

Man sieht, daß $I(\underline{n})$ das Betragsquadrat des Hilbertraum-Vektors

$$(\underline{n} \cdot \underline{\mathcal{J}}) \sum_K c_K^3 | \mathcal{K} \rangle \quad (C,113)$$

ist, das nur dann verschwindet, wenn dieser Vektor gleich Null ist. Bei geeigneter Verdrehung des körper-

festen Systems um konstante Winkel (hier : Übergang $n \cdot J \rightarrow J_z$) würde dies das Vorliegen eines ($K=0$)-Rotationszustandes bedeuten, was hier aber ausgeschlossen werden kann.

Wir können also in der Tat von der Variationsgleichung (C,110) mit den Nebenbedingungen (C,108) ausgehen.

Die Lösung des so vereinfachten Problems geschieht, wie früher, durch die Entwicklung

$$S_a \cdot \psi_o^{intr} = \sum_n a_n^{(a)} \psi_n^{intr} \quad (C,114)$$

Dies führt dann zu den Koeffizienten $a_n^{(a)} (n \neq 0)$:

$$a_n^{(a)} = \frac{\hbar}{i} \lambda_{ba} \frac{\langle n | j_b' | 0 \rangle}{E_n - E_o} \quad (C,115)$$

Eingesetzt in die Nebenbedingungen (C,108) ergibt dies die folgende Bestimmungsgleichung für λ_{ab} :

$$(\Theta_{cr})_{ac} \cdot \lambda_{cb} = \delta_{ab} \quad (C,116)$$

Dabei haben wir als Abkürzung den "Cranking-Trägheitstensor"

$$(\Theta_{cr})_{ab} = 2 \sum_{n \neq 0} \frac{\langle 0 | j_a' | n \rangle \langle n | j_b' | 0 \rangle}{E_n - E_o} \quad (C,117)$$

verwendet. Dieser ist symmetrisch und bildet eine nicht-singuläre Matrix. Andernfalls wäre, was ebenso wie oben bei $i_{ab}^{(2)}$ einzusehen ist, bei geeigneter Drehung beispielsweise $j_z' | 0 \rangle = 0$, was nur bei Axialsymmetrie gilt.

Wir erhalten also :

$$\lambda_{ab} = (\Theta_{cr}^{-1})_{ab} \quad (C,118)$$

Als Lösung des Problems hat sich somit ergeben :

$$S_a \psi_o^{intr} = \frac{\hbar}{i} (\Theta_{cr}^{-1})_{ab} \sum_{n \neq 0} \frac{\langle n | j_b' | 0 \rangle}{E_n - E_o} \psi_n^{intr} \quad (C,119)$$

Der reziproke effektive Trägheitstensor

$$(\Theta_{eff}^{-1})_{ab} = \langle 0 | \frac{1}{m} (\nabla'_i S_a) \cdot (\nabla'_i S_b) | 0 \rangle \quad (C,120)$$

errechnet sich dann mit Hilfe der Variationsgleichungen (C,110) zu

$$(\Theta_{eff}^{-1})_{ab} = \lambda_{ca} \langle \frac{1}{\hbar} j'_c S_b \rangle = \lambda_{ba} = (\Theta_{cr}^{-1})_{ab} \quad (C,121)$$

woraus schließlich folgt :

$$(\Theta_{eff})_{ab} = (\Theta_{cr})_{ab} \quad (C,122)$$

Wir sehen hier also, daß der effektive Trägheitstensor für starke Deformation durch die "triaxiale" Cranking-Formel (C,117) gegeben ist.

Dieses Ergebnis stellt eine Verallgemeinerung des Resultats (C,99) dar, das für (K=0)-Banden gültig war. Man kann nämlich nachträglich die Formel (C,117) auf eine axialsymmetrische Wellenfunktion Ψ_0^{intr} spezialisieren, was zu $(\Theta_{cr})_{11} = (\Theta_{cr})_{22} = \Theta_{cr}$ und $(\Theta_{cr})_{33} = 0$ führen würde.

Die Möglichkeit, das körperfeste System um konstante Winkel zu verdrehen, von der in Abschnitt A.III.2.c die Rede war, kann an dieser Stelle ausgenützt werden, um auf die Hauptachsen des effektiven Trägheitstensors $(\Theta_{eff})_{ab}$ überzugehen. Mit einer solchen Drehung ist natürlich auch eine entsprechende Drehung der Intrinsic-Wellenfunktionen Ψ_0^{intr} und Ψ_n^{intr} verbunden. Die diagonale Form von $(\Theta_{eff})_{ab}$ liegt übrigens bereits vor, wenn die Wellenfunktion Ψ_0^{intr} die üblicherweise vorausgesetzten Klappsymmetrien besitzt (Drehung um drei orthogonale Achsen um jeweils 180°).

4. Begründung der Näherungen im Fall starker Deformation

In diesem Abschnitt soll die Begründung für die in C.III.2 und C.III.3 mit (i) und (ii) bezeichneten Näherungen gegeben werden. Dabei können wir uns exemplarisch auf den axialsymmetrischen Fall beschränken, da die Verallgemeinerung auf den triaxialen Fall ohne Schwierigkeiten möglich ist.

a) Kleinwinkelnäherung

Wir müssen nachprüfen, ob für die erhaltene Lösung des Extremalprinzips die Ungleichung (C,78) erfüllt ist, die man mit Hilfe der Funktionen S_1 und S_2 folgendermaßen schreiben kann :

$$\langle S_1^2 + S_2^2 \rangle \ll 1 \quad (C,123)$$

Setzen wir hier etwa $S_1(x')$ nach (C,96) ein, so erhalten wir :

$$\langle S_1^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{\Theta_{cr}^2} \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n | j_1' | 0 \rangle|^2}{(E_n - E_0)^2} \quad (C,124)$$

Zur Abschätzung dieses Ausdrucks bezeichnen wir mit

$$\Delta E \approx E_n - E_0 \quad (C,125)$$

die charakteristische Energiedifferenz, die oben im Energienenner auftritt. Die Energie ΔE charakterisiert also die Anregungsenergien, die bei Einteilchenanregungen, oder genauer nicht-rotatorischen Anregungen auftreten.

Damit läßt sich schreiben :

$$\langle S_1^2 \rangle \approx \frac{\hbar^2}{\Theta_{cr}^2} \frac{1}{\Delta E} \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n | j_1' | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0} = \frac{\hbar^2}{2\Theta_{cr}} \frac{1}{\Delta E} \quad (C,126)$$

Entsprechendes gilt natürlich für S_2 , so daß die Forderung (C,123) zu

$$\langle S_1^2 + S_2^2 \rangle \approx \frac{\hbar^2}{\Theta_{cr}} \frac{1}{\Delta E} \ll 1 \quad (C,127)$$

Äquivalent ist. Dies besagt, daß die Rotationsenergien, charakterisiert durch $\hbar^2/\Theta_{cr}$, klein gegenüber den inneren Anregungsenergien, charakterisiert durch ΔE , sein müssen.

Diese Aussage hängt aber mit der Forderung (C,76) nach starker Deformation zusammen. Wir können nämlich für Θ_{cr} unter Verwendung von ΔE nach (C,125) schreiben :

$$\begin{aligned} \Theta_{cr} &\approx \frac{2}{\Delta E} \sum_{n \neq 0} \langle 0 | j'_1 | n \rangle \langle n | j'_1 | 0 \rangle = \frac{2}{\Delta E} \langle 0 | j_1'^2 | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\Delta E} \langle 0 | j_1'^2 | 0 \rangle \gg \frac{\hbar^2}{\Delta E} \end{aligned} \quad (C,128)$$

oder

$$\frac{\hbar^2}{\Theta_{cr}} \frac{1}{\Delta E} \ll 1 \quad (C,129)$$

Die letzte Ungleichung ist somit äquivalent zur Voraussetzung starker Deformation, womit die Rechtfertigung für die Kleinwinkelnäherung (C,78) bzw. (C,105) gegeben ist.

b) Mittlung der Mitdrehbedingungen

Wir müssen hier untersuchen, ob die Lösung (C,96) für S_1 und S_2 so beschaffen ist, daß die Nebenbedingungen (C,74) erfüllt sind. Bei Berücksichtigung der Kleinwinkelnäherung führt das zu der Frage, ob die Beziehungen

$$\frac{i}{\hbar} j'_a S_b = \delta_{ab} \quad (C,130)$$

nicht nur im Mittel, was in (C,81) ausgedrückt ist, richtig sind, sondern so, wie sie in Formel (C,130)

formuliert sind. Greifen wir exemplarisch etwa den Fall $a = b = 1$ heraus, so ist die Gleichung

$$\frac{i}{\hbar} j_1' S_1 \approx 1 \quad (C,131)$$

gültig, wenn wir zeigen können, daß für die Schwankung gilt :

$$\langle 0 | (\frac{i}{\hbar} j_1' S_1 - 1)^2 | 0 \rangle = \langle 0 | (\frac{i}{\hbar} j_1' S_1)^2 | 0 \rangle - 1 \ll 1 \quad (C,132)$$

Dies soll zuerst an einem einfachen konkreten Fall erläutert werden :

Wir nehmen für Ψ_0^{intr} die Grundzustandswellenfunktion eines Systems von N Bosonen (für Fermionen läßt sich diese Rechnung nicht explizit durchführen) in einem deformierten Oszillator (vgl. C.III.2a). Alle Teilchen sitzen dann im Grundzustand des Oszillators. Die Voraussetzung starker Deformation besagt damit (s. Anhang D.X) :

$$\frac{1}{\hbar^2} \langle 0 | j'^2 | 0 \rangle = \frac{N (\omega_1 - \omega_3)^2}{2 \omega_1 \omega_3} \gg 1 \quad (C,133)$$

Die Funktionen S_1 und S_2 lassen sich hier explizit ausrechnen :

$$S_1(x') = - \frac{2m \omega_1 \omega_3}{N \hbar (\omega_1 - \omega_3)} \sum_i x'_{i2} x'_{i3}$$

$$S_2(x') = \frac{2m \omega_1 \omega_3}{N \hbar (\omega_1 - \omega_3)} \sum_i x'_{i1} x'_{i3} \quad (C,134)$$

Dies bedeutet, daß das körperfeste System durch die Hauptträgheitsachsen gegeben ist, was bekanntlich zum hydrodynamischen Wert für das Trägheitsmoment führt.

Auch die Schwankung der Nebenbedingung (C,131) können wir errechnen, wobei sich ergibt :

$$\begin{aligned} \langle (\frac{i}{\hbar} j'_1 S_1)^2 \rangle - 1 &= \frac{2(\omega_1^2 + \omega_3^2)}{N(\omega_1 - \omega_3)^2} = \\ &= \frac{\hbar^2}{\langle j'^2 \rangle} \left(\frac{\omega_1}{\omega_3} + \frac{\omega_3}{\omega_1} \right) \approx \frac{2\hbar^2}{\langle j'^2 \rangle} \ll 1 \end{aligned} \quad (C,135)$$

Die Übertragung dieser Abschätzung von dem gegebenen Beispiel auf das allgemeine Problem ist nicht ganz einfach, weil man die Funktionen S_1 und S_2 nicht explizit in der Hand hat, sondern nur in Form der Entwicklung (C,96). Wir werden aber zeigen, daß im Fall starker Deformation folgendes gilt :

$$\begin{aligned} \langle 0 | F \cdot \frac{i}{\hbar} j'_1 S_1 | 0 \rangle - \langle 0 | F | 0 \rangle &\approx \\ \approx \frac{\hbar^2}{\Theta_{cr}} \frac{1}{\Delta E} \langle 0 | F | 0 \rangle &\ll \langle 0 | F | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (C,136)$$

wobei $F = F(x')$ eine reelle Funktion sein kann, die mit x' nicht zu stark, d.h. nur in dem Maße variiert, wie es auch die Wellenfunktion Ψ_0^{intr} tut. Diese Eigenschaft hat aber auch die Größe $\frac{i}{\hbar} j'_1 S_1(x')$, weil sich $S_1(x')$ nach Formel (C,96) aus Ψ_0^{intr} und den Ψ_n^{intr} zusammensetzt. Deshalb ist es zulässig, die Funktion F in (C,136) durch $\frac{i}{\hbar} j'_1 S_1$ zu ersetzen, so daß die Schwankungsbedingung (C,132) wegen $\langle \frac{i}{\hbar} j'_1 S_1 \rangle = 1$ erfüllt ist.

Zur Ableitung von (C,136) gehen wir nun folgendermaßen vor : Wir setzen S_1 aus (C,96) in die linke Seite von (C,136) ein und erhalten :

$$\begin{aligned} \langle F \cdot \frac{i}{\hbar} j'_1 S_1 \rangle - \langle F \rangle &= \\ = \frac{1}{\Theta_{cr}} \sum_{n \neq 0} \frac{1}{E_n - E_0} &(\langle 0 | F \cdot j'_1 | n \rangle \langle n | j'_1 | 0 \rangle + \langle 0 | j'_1 F | n \rangle \langle n | j'_1 | 0 \rangle) - \langle F \rangle \\ = \frac{1}{\Theta_{cr}} \sum_{n \neq 0} \frac{1}{E_n - E_0} &\langle 0 | (F - \langle F \rangle) \cdot j'_1 + j'_1 \cdot (F - \langle F \rangle) | n \rangle \langle n | j'_1 | 0 \rangle \end{aligned} \quad (C,137)$$

Wesentlich ist jetzt wiederum die Einführung der charakteristischen Energiedifferenz ΔE nach (C,125) sowie die Verwendung der Eigenwertgleichungen (C,86) und (C,87), die wir hier in der Form

$$H_{\text{def}} |0\rangle = E_0 |0\rangle, \quad H_{\text{def}} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (\text{C},138)$$

mit

$$H_{\text{def}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i' + V_{\text{def}} \quad (\text{C},139)$$

schreiben.

Damit läßt sich der Ausdruck (C,137) näherungsweise umformen zu

$$\frac{1}{\Theta_{\text{cr}}} \frac{1}{(\Delta E)^2} \sum_{n \neq 0} \langle 0 | (F - \langle F \rangle) \cdot j_i' + j_i' (F - \langle F \rangle) | n \rangle \langle n | [H_{\text{def}}, j_i'] | 0 \rangle,$$

was zu einem Erwartungswert zusammengezogen werden kann. Nach einigen weiteren Umformungen (vgl. Anhang D.XI) erhalten wir schließlich:

$$\begin{aligned} \langle F \cdot \frac{1}{\hbar} j_i' S_1 \rangle - \langle F \rangle &\approx \\ &\approx \frac{1}{2\Theta_{\text{cr}}} \frac{1}{(\Delta E)^3} \langle 0 | [[F, H_{\text{def}}], [j_i', [H_{\text{def}}, j_i']]] | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\Theta_{\text{cr}}} \frac{1}{(\Delta E)^3} \left\langle -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i' (j_i'^2 V_{\text{def}}) \cdot \nabla_i' F \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{C},140)$$

In die letzte Formel geht vom Potential V_{def} nur noch der deformierte Anteil ein. Wir können uns nun unter V_{def} das Potential eines deformierten Oszillators vorstellen, ohne eine wesentliche Einschränkung der Allgemeinheit vorzunehmen. Die sicherlich in V_{def} vorhandene drehinvariante Restwechselwirkung zwischen den Teilchen ist dabei ganz unwesentlich.

Damit errechnen wir:

$$\begin{aligned} j_i'^2 V_{\text{def}} &= m \hbar^2 (\omega_1^2 - \omega_3^2) \sum_i (x_{i2}'^2 - x_{i3}'^2) \\ &\approx (\Delta E)^2 \cdot m \sum_i (x_{i2}'^2 - x_{i3}'^2), \end{aligned} \quad (\text{C},141)$$

wobei wir von

$$\Delta E \approx \hbar (\omega_1 \pm \omega_3) \quad (\omega_1 > \omega_3) \quad (C, 142)$$

Gebrauch gemacht haben.

Daher ergibt sich aus (C, 140) unter Berücksichtigung von (C, 141) der Ausdruck

$$\frac{\hbar^2}{\Theta_{cr}} \frac{1}{\Delta E} \left\langle x'_{i3} \frac{\partial F}{\partial x'_{i3}} - x'_{i2} \frac{\partial F}{\partial x'_{i2}} \right\rangle \quad (C, 143)$$

Wenn wir nun voraussetzen, daß die Funktion $F(x')$ nur in dem Maße variiert, wie man es durch eine für die Wellenfunktion Ψ_0^{int} charakteristische Länge ausdrücken kann, also

$$\nabla F \approx \frac{1}{b} F \quad \text{mit } b = \begin{array}{l} \text{charakt. Länge, etwa} \\ \text{Oszillatorlänge} \end{array}$$

so ist der Erwartungswert in (C, 143) von der gleichen Größenordnung wie $\langle F \rangle$.

Damit haben wir die gewünschte Abschätzung (C, 136)

$$\langle F \cdot \frac{i}{\hbar} j'_1 S_1 \rangle - \langle F \rangle \approx \frac{\hbar^2}{\Theta_{cr}} \frac{1}{\Delta E} \langle F \rangle$$

erhalten.

Das exemplarische Herausgreifen von $a = b = 1$ bedeutet bei dieser Ableitung natürlich keine Einschränkung. Somit ist die Begründung für die Mittelung der Nebenbedingungen allgemein gegeben, wobei als einziger entscheidender Punkt die Voraussetzung starker Deformation eingegangen ist.

Zusammenfassung

Ausgehend von den grundlegenden Arbeiten von Ruder und Volz [43 - 46] wurde in Teil A die allgemeine Theorie der kollektiven Rotationen von quantenmechanischen Mehrteilchensystemen dargestellt. Der wesentliche Punkt ist dabei, nicht eine bestimmte Wahl des körperfesten Koordinatensystems vorzunehmen, sondern die Definition der die Rotation beschreibenden kollektiven Koordinaten (Eulersche Winkel) vorläufig offenzulassen. Die Zerlegung des Hamiltonoperators in innere, kollektive und Kopplungsanteile hängt jedoch von der Definition des körperfesten Systems ab. Dies ermöglicht es, abhängig von dem jeweils betrachteten Ausgangszustand, ein optimales inneres System zu wählen, so daß für die entsprechende Rotationsbande in den Wellenfunktionen eine möglichst gute Entkopplung zwischen innerer Bewegung und kollektiver Rotation erreicht wird (spezifische Entkopplung). Die Lösung des zugehörigen Extremalprinzips führt dann zur Bestimmung des Trägheitsmoments bzw. des Trägheitstensors, der die entsprechende Rotationsbande für nicht allzu große Drehimpulse charakterisiert. Allerdings ergeben sich bei der praktischen Anwendung dieser Methode auf Mehrteilchensysteme sehr schnell große Schwierigkeiten, da die Beschreibung der inneren Bewegung durch echte innere Koordinaten im allgemeinen recht kompliziert ist.

Deshalb wurde in Teil B das Rotor + Particle - Modell behandelt, das bei einem Außenteilchen als einfaches Modell für einen ug- bzw. gu-Kern betrachtet werden kann. Als innere Koordinaten bieten sich dabei die auf das Rumpfsystem bezogenen kartesischen Koordinaten der Außenteilchen an. Bei der Diskussion dieses Modells

zeigte sich, daß sich das Zusatzträgheitsmoment der Außenteilchen, das bei sehr großem Rumpfträgheitsmoment durch die Cranking-Formel gegeben ist, auch mit Hilfe der Methode der spezifischen Entkopplung gewinnen läßt.

Die Hauptanwendung der allgemeinen Theorie auf deformierte gg -Kerne wurde in Teil C durchgeführt. Dazu mußte zuerst untersucht werden, wie man, ausgehend vom echten Vielteilchenhamiltonoperator, innerlich deformierte Zustände beschreiben kann. Dies gelingt dadurch, daß man die Teilchenkoordinaten auf ein körperfestes System bezieht und einen entsprechenden Intrinsic-Hamiltonoperator aufstellt, der die Teilchenbewegung in diesem inneren Bezugssystem bestimmt. Die Eigenfunktionen dieses Operators stellen sich als deformiert heraus und können deshalb zur Beschreibung der inneren Struktur des Kerns verwendet werden.

Ohne auf die bekannten näherungsweise Behandlungsmöglichkeiten eines solchen Vielteilchenoperators wie des Intrinsic-Hamiltonoperators näher einzugehen, wurden dann die auf einem vorgegebenen, drehimpulsfreien Ausgangszustand sich aufbauenden Rotationsbanden untersucht. Es zeigte sich, daß das Extremalprinzip der spezifischen Entkopplung im Fall starker Deformation vollständig gelöst werden kann und bei Axialsymmetrie, also $(K=0)$ -Banden, auf die Cranking-Formel für das effektive Trägheitsmoment führt. Im nicht-axialsymmetrischen Fall ergab sich als eine entsprechende Verallgemeinerung für den Trägheitstensor die triaxiale Cranking-Formel. Die Ableitung dieser Ergebnisse erfolgte ohne die Verwendung irgendwelcher semiklassischer Zusatzannahmen. Abweichungen von der Cranking-Formel sind zu erwarten, wenn keine hinreichend starke Deformation des Kerns vorliegt.

Die vorstehenden Überlegungen wurden ohne Berücksichtigung des Spins der einzelnen Teilchen durchgeführt. Um diese Einschränkung zu beheben, könnte die allgemeine Theorie in der Richtung erweitert werden, daß man vom Spin abhängige Definitionen des körperfesten Systems zuläßt. Eine Erweiterung unserer Betrachtungen wird auch dann notwendig, wenn sich die innere Struktur des Ausgangszustandes mit wachsendem Drehimpuls wesentlich verändert, wie es z.B. beim sogenannten Backbending [56] der Fall ist.

Teil D : Anhang

I. Eulersche Winkel und Drehimpulse

Die körperfesten Einheitsvektoren $\underline{e}_a$ sind durch die Eulerschen Winkel $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$ mit Hilfe der folgenden Drehmatrix (Drehung von den raumfesten auf die körperfesten Achsen) auszudrücken (vgl. [57]) :

$$(e_{a\mu}) = \begin{array}{c|ccc} \mu \backslash a & 1 & 2 & 3 \\ \hline x & \cos\alpha \cos\beta \cos\gamma & -\cos\alpha \cos\beta \sin\gamma & \sin\beta \cos\alpha \\ & -\sin\alpha \sin\gamma & -\sin\alpha \cos\gamma & \\ \hline y & \sin\alpha \cos\beta \cos\gamma & -\sin\alpha \cos\beta \sin\gamma & \sin\beta \sin\alpha \\ & +\cos\alpha \sin\gamma & +\cos\alpha \cos\gamma & \\ \hline z & -\sin\beta \cos\gamma & \sin\beta \sin\gamma & \cos\beta \end{array} \quad (D,1)$$

Unter Benützung der raumfesten Drehimpulskomponenten J_μ ($\mu = x, y, z$), die die normalen Vertauschungsrelationen

$$[J_\mu, J_\nu] = i\hbar \varepsilon_{\mu\nu\lambda} J_\lambda \quad (D,2)$$

erfüllen, lassen sich die Dreheigenschaften der $\underline{e}_a$ folgendermaßen formulieren :

$$[J_\mu, e_{a\nu}] = i\hbar \varepsilon_{\mu\nu\lambda} e_{a\lambda} \quad (D,3)$$

(Die expliziten Ausdrücke für J_μ in Eulerschen Winkeln findet man etwa in [47].)

Für die körperfesten Drehimpulskomponenten

$$J_a = \underline{e}_a \cdot \underline{J} = e_{a\mu} J_\mu \quad (D,4)$$

errechnet man dann :

$$\begin{aligned} [\mathcal{F}_a, \mathcal{F}_\mu] &= [e_{a\nu} \mathcal{F}_\nu, \mathcal{F}_\mu] = e_{a\nu} [\mathcal{F}_\nu, \mathcal{F}_\mu] + [e_{a\lambda}, \mathcal{F}_\mu] \mathcal{F}_\lambda \\ &= e_{a\nu} i\hbar \varepsilon_{\nu\mu\lambda} \mathcal{F}_\lambda - i\hbar \varepsilon_{\mu\lambda\nu} e_{a\nu} \mathcal{F}_\lambda, \end{aligned}$$

also

$$[\mathcal{F}_a, \mathcal{F}_\mu] = 0 \quad (\text{D}, 5)$$

Ebenso folgt :

$$[\mathcal{F}_a, e_{b\mu}] = e_{a\nu} [\mathcal{F}_\nu, e_{b\mu}] = i\hbar \varepsilon_{\nu\mu\lambda} e_{a\nu} e_{b\lambda},$$

also

$$[\mathcal{F}_a, e_{b\mu}] = -i\hbar \varepsilon_{abc} e_{c\mu} \quad (\text{D}, 6)$$

Daraus ergibt sich dann :

$$[\mathcal{F}_a, \mathcal{F}_b] = [\mathcal{F}_a, e_{b\mu}] \mathcal{F}_\mu = -i\hbar \varepsilon_{abc} e_{c\mu} \mathcal{F}_\mu$$

Somit erhalten wir für die körperfesten Komponenten J_a die anomalen Vertauschungsrelationen :

$$[\mathcal{F}_a, \mathcal{F}_b] = -i\hbar \varepsilon_{abc} \mathcal{F}_c \quad (\text{D}, 7)$$

II. Kreiselfunktionen und ihre Eigenschaften

a) Aus den durch

$$\begin{aligned} D_{MM'}^{\vec{J}}(\alpha\beta\gamma) &= \langle JM | e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\vec{J}_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta\vec{J}_y} e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma\vec{J}_z} | JM' \rangle \\ &= e^{-iM\alpha} d_{MM'}^{\vec{J}}(\beta) e^{-iM'\gamma} \quad (D,8) \end{aligned}$$

definierten Darstellungskoeffizienten der Drehgruppe
(vgl. Rose [58])

$$\left(\begin{array}{l} \text{Darstellungseigenschaft :} \\ D_{MM'}^{\vec{J}}(\Omega_1\Omega_2) = D_{MM''}^{\vec{J}}(\Omega_1) D_{M''M'}^{\vec{J}}(\Omega_2) \quad (D,9) \end{array} \right)$$

bildet man die normierten Kreiseigenfunktionen

$$|JMK\rangle = \sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} D_{MK}^{\vec{J}*}(\Omega) \quad (D,10)$$

Deren Matrixelemente mit den Drehimpulskomponenten J_μ
bzw. J_a sind :

$$\langle J'M'K' | \vec{J}_z | JMK \rangle = \hbar M \cdot \delta_{MM'} \delta_{KK'} \delta_{J'J} \quad (D,11)$$

$$\langle J'M'K' | \vec{J}_x \pm i\vec{J}_y | JMK \rangle = \hbar \sqrt{J(J+1) - M(M\pm 1)} \cdot \delta_{M',M\pm 1} \delta_{KK'} \delta_{J'J}$$

und

$$\langle J'M'K' | \vec{J}_3 | JMK \rangle = \hbar K \cdot \delta_{KK'} \delta_{MM'} \delta_{J'J} \quad (D,12)$$

$$\langle J'M'K' | \vec{J}_1 \pm i\vec{J}_2 | JMK \rangle = \hbar \sqrt{J(J+1) - K(K\mp 1)} \cdot \delta_{K',K\mp 1} \delta_{MM'} \delta_{J'J}$$

Die $|JMK\rangle$ heißen Kreiselfunktionen, weil die allgemeine Eigenfunktion des Kreisel-Hamiltonoperators

$$H_{\text{Kreisel}} = \frac{1}{2} \vec{\Theta}_{ab}^{-1} \vec{J}_a \vec{J}_b \quad (D,13)$$

sich in der Form

$$\sum_K c_K^3 |JM K\rangle \quad (D,14)$$

schreiben läßt.

Die für (K=0)-Banden wesentlichen Matrixelemente

$$\langle JM0 | \tilde{J}_a \tilde{J}_b | JM0 \rangle \equiv \langle J0 | \tilde{J}_a \tilde{J}_b | J0 \rangle$$

kann man mit Hilfe von (D,12) leicht angeben :

$$\langle J0 | \tilde{J}_1^2 | J0 \rangle = \langle J0 | \tilde{J}_2^2 | J0 \rangle = \frac{1}{2} J(J+1)$$

$$\langle J0 | \tilde{J}_1 \tilde{J}_2 + \tilde{J}_2 \tilde{J}_1 | J0 \rangle = 0 ; \quad \langle J0 | \tilde{J}_3^2 | J0 \rangle = 0 \quad (D,15)$$

$$\langle J0 | \tilde{J}_1 \tilde{J}_3 | J0 \rangle = \langle J0 | \tilde{J}_2 \tilde{J}_3 | J0 \rangle = 0$$

b) Die in Abschnitt A.III.2.b benötigte Summenformel

$$\sum_K \langle JK | \tilde{J}_a \tilde{J}_b | JK \rangle = \frac{1}{3} J(J+1)(2J+1) \delta_{ab} \quad (D,16)$$

läßt sich entweder mit den Matrixelementen (D,12) explizit nachrechnen oder durch die folgende Überlegung beweisen :

Bei einer Drehung mit der vorgegebenen konstanten Drehmatrix t_{ab} ergeben sich die Transformationen (vgl. A.II)

$$\tilde{J}_a = t_{ab} \tilde{J}_b ; \quad |JM K\rangle_{\Omega} = |JM K'\rangle_{\Omega} D_{KK'}^J(t) \quad , \quad (D,17)$$

so daß wir schreiben können :

$$\begin{aligned} \sum_K \langle JK | \tilde{J}_a \tilde{J}_b | JK \rangle &= D_{KK'}^{J*}(t) D_{KK''}^J(t) t_{ac} t_{bf} \sum_K \langle JK | \tilde{J}_c \tilde{J}_f | JK \rangle_{\Omega} \\ &= t_{ac} t_{bf} \sum_K \langle JK | \tilde{J}_c \tilde{J}_f | JK \rangle \end{aligned}$$

Dies besagt, daß die linke Seite von (D,16) ein invarianter Tensor 2. Stufe bezüglich der Indizes a,b ist, also mit allen Drehmatrizen t_{ab} vertauscht und somit nur proportional der Einheitsmatrix sein kann :

$$\sum_K \langle \mathfrak{J}K | \mathfrak{J}_a \mathfrak{J}_b | \mathfrak{J}K \rangle = C \cdot \delta_{ab} \quad (D,18)$$

Spurbildung ergibt für die Konstante C :

$$3C = \sum_K \langle \mathfrak{J}K | \mathfrak{J}^2 | \mathfrak{J}K \rangle = (2\mathfrak{J}+1) \mathfrak{J}(\mathfrak{J}+1) ,$$

womit (D,16) bewiesen ist.

c) Die Entwicklung der D-Funktionen für kleines β läßt sich leicht aus der Definition (D,8) gewinnen :

$$\begin{aligned} D_{MM'}^{\mathfrak{J}}(\alpha\beta\gamma) &= e^{-iM\alpha} e^{-iM'\gamma} \left(\delta_{MM'} - \frac{i}{\hbar} \beta \langle \mathfrak{J}M | \mathfrak{J}_y | \mathfrak{J}M' \rangle + \dots \right) \\ &= e^{-iM(\alpha+\gamma)} \left[\delta_{MM'} + \frac{i}{2} \beta \left(\sqrt{\mathfrak{J}(\mathfrak{J}+1)-M(M+1)} e^{-i\gamma} \cdot \delta_{M',M+1} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \sqrt{\mathfrak{J}(\mathfrak{J}+1)-M(M-1)} e^{i\gamma} \cdot \delta_{M',M-1} \right) \right] + \mathcal{O}(\beta^2) \end{aligned}$$

(D,19)

was unmittelbar zu den Formeln (B,38) führt.

III. Hermitizität der Terme von H

a) Die Operatoren ($a = 1, 2, 3$)

$$\mathcal{A}_a = \frac{\hbar}{2i} (A_{j,a}(q) \frac{\partial}{\partial q_j} + G_a(q)) \quad (D,20)$$

sind hermitisch genau dann, wenn für zwei beliebige Wellenfunktionen $\Phi = \Phi(q)$ und $\Psi = \Psi(q)$ gilt :

$$-\int \Phi(q) [\mathcal{A}_a \Psi^*(q)] \sqrt{g} dq = \int \Psi^*(q) [\mathcal{A}_a \Phi(q)] \sqrt{g} dq \quad (D,21)$$

Die linke Seite läßt sich mittels partieller Integration umformen zu

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar}{2i} \int [\Psi^*(q) \frac{\partial}{\partial q_j} (\sqrt{g} A_{j,a} \Phi(q)) - \Psi^*(q) G_a \Phi(q) \sqrt{g}] dq = \\ & = \int \Psi^*(q) [\mathcal{A}_a \Phi(q)] \sqrt{g} dq + \\ & + \int \Psi^*(q) \left[\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_j} (\sqrt{g} A_{j,a}) - 2 G_a \right] \Phi(q) \sqrt{g} dq \end{aligned}$$

Die Hermitizitätsbedingung (D,21) ergibt also, wegen der Beliebigkeit von Φ und Ψ :

$$G_a = \frac{i}{2} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_j} (\sqrt{g} A_{j,a}) \quad (D,22)$$

b) Der Operator H_0 nach (A,15a) ist hermitisch genau dann, wenn die Beziehung

$$\begin{aligned} & \int \Phi(q) \left[(M_{j,l}^{-1} \frac{\partial^2}{\partial q_j \partial q_l} + N_j \frac{\partial}{\partial q_j}) \Psi^*(q) \right] \sqrt{g} dq = \\ & = \int \Psi^*(q) \left[(M_{j,l}^{-1} \frac{\partial^2}{\partial q_j \partial q_l} + N_j \frac{\partial}{\partial q_j}) \Phi(q) \right] \sqrt{g} dq \end{aligned} \quad (D,23)$$

für beliebiges Φ und Ψ gültig ist.

Die linke Seite von (D,23) läßt sich wiederum durch partielle Integration umformen, was den folgenden Ausdruck ergibt :

$$\int \left\{ -M_{j\ell}^{-1} \frac{\partial \Phi}{\partial q_j} \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_\ell} + \Phi \cdot \left[N_j - \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_\ell} (\sqrt{g} M_{j\ell}^{-1}) \right] \cdot \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_j} \right\} \sqrt{g} dq$$

Die entsprechende Umformung der rechten Seite von (D,23) führt dann zu der Hermitizitätsbedingung

$$\int \left[N_j - \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_\ell} (\sqrt{g} M_{j\ell}^{-1}) \right] \left(\Phi \frac{\partial \Psi^*}{\partial q_j} - \Psi^* \frac{\partial \Phi}{\partial q_j} \right) \sqrt{g} dq = 0 ,$$

aus der sich, da Φ und Ψ beliebig sind, ergibt :

$$N_j = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_\ell} (\sqrt{g} M_{j\ell}^{-1}) \quad (D,24)$$

IV. Zur Variation von E_{rot}

In Abschnitt A.III.2.c ist ausgeführt, daß bei der Variation von

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle \langle \mathcal{F}K | \mathcal{F}_a \mathcal{F}_b | \mathcal{F}K' \rangle c_K^{\mathcal{F}*} c_{K'}^{\mathcal{F}} \quad (\text{D}, 25)$$

die Koeffizienten c_K^J durch die Eigenwertgleichung

$$\frac{1}{2} \langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle \langle \mathcal{F}K | \mathcal{F}_a \mathcal{F}_b | \mathcal{F}K' \rangle c_{K'}^{\mathcal{F}} = \varepsilon_{\mathcal{F}} \cdot c_K^{\mathcal{F}} \quad (\text{D}, 26)$$

gegeben sind. Deshalb kann man bei

$$\delta E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \delta \langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle \langle \mathcal{F}K | \mathcal{F}_a \mathcal{F}_b | \mathcal{F}K' \rangle c_K^{\mathcal{F}*} c_{K'}^{\mathcal{F}} + \quad (\text{D}, 27)$$

$$+ \delta c_K^{\mathcal{F}*} \cdot \frac{1}{2} \langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle \langle \mathcal{F}K | \mathcal{F}_a \mathcal{F}_b | \mathcal{F}K' \rangle c_{K'}^{\mathcal{F}} + c_K^{\mathcal{F}*} \frac{1}{2} \delta \langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle \langle \mathcal{F}K | \mathcal{F}_a \mathcal{F}_b | \mathcal{F}K' \rangle \cdot \delta c_{K'}^{\mathcal{F}}$$

im 2. und 3. Term die Gleichung (D,26) bzw. (D,26)* einsetzen, nämlich

$$\delta c_K^{\mathcal{F}*} \cdot \varepsilon_{\mathcal{F}} \cdot c_K^{\mathcal{F}} + c_{K'}^{\mathcal{F}*} \cdot \varepsilon_{\mathcal{F}} \cdot \delta c_{K'}^{\mathcal{F}} = \varepsilon_{\mathcal{F}} \cdot \delta (c_K^{\mathcal{F}*} c_K^{\mathcal{F}}) = 0 \quad , \quad (\text{D}, 28)$$

wobei die Normierung

$$\sum_K c_K^{\mathcal{F}*} c_K^{\mathcal{F}} = 1 \quad (\text{D}, 29)$$

zu berücksichtigen ist.

Somit folgt aus (D,27) :

$$\delta E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \delta \langle \Theta_{ab}^{-1} \rangle \langle \mathcal{F}K | \mathcal{F}_a \mathcal{F}_b | \mathcal{F}K' \rangle c_K^{\mathcal{F}*} c_{K'}^{\mathcal{F}} \stackrel{!}{=} 0 \quad (\text{D}, 30)$$

Das Extremalprinzip für E_{rot} ist damit äquivalent zu (D,30), der Gleichung, die man aus E_{rot} durch Variation des körperfesten Systems bei festgehaltenen c_K^J erhält, und (D,26), der Eigenwertgleichung, die aus E_{rot} durch Variation der Koeffizienten c_K^J bei festgehaltenem körperfestem System zu gewinnen ist.

V. Mitführungskoeffizienten in Eulerschen Winkeln

Die Einführungskoeffizienten

$$B_{ab}^i = \frac{1}{2} \epsilon_{bcf} \underline{e}_a \cdot \frac{\partial e_{cf}}{\partial \underline{x}_i} e_{f\mu} \quad (D, 31)$$

lassen sich mit Hilfe von (D,1) durch die Eulerschen Winkel ausdrücken, die man dabei als gegebene Funktionen der Teilchenkoordinaten x betrachtet. Eine elementare Rechnung ergibt :

$$\begin{aligned} B_{a1}^i &= -\sin\beta \cos\gamma \underline{e}_a \cdot (\underline{V}_i \alpha) + \sin\gamma \underline{e}_a \cdot (\underline{V}_i \beta) \\ B_{a2}^i &= \sin\beta \sin\gamma \underline{e}_a \cdot (\underline{V}_i \alpha) + \cos\gamma \underline{e}_a \cdot (\underline{V}_i \beta) \\ B_{a3}^i &= \cos\beta \underline{e}_a \cdot (\underline{V}_i \alpha) + \underline{e}_a \cdot (\underline{V}_i \gamma) \end{aligned} \quad (D, 32)$$

Die bei (K=0)-Banden auftretende Kombination der reziproken Trägheitsmomente

$$\Theta_{11}^{-1} + \Theta_{22}^{-1} = \frac{1}{m_i} B_{a1}^i B_{a1}^i + \frac{1}{m_i} B_{a2}^i B_{a2}^i \quad (D, 33)$$

kann man dann schreiben als

$$\Theta_{11}^{-1} + \Theta_{22}^{-1} = \sin^2\beta \sum_i \frac{1}{m_i} (\underline{V}_i \alpha)^2 + \sum_i \frac{1}{m_i} (\underline{V}_i \beta)^2 \quad (D, 34)$$

Die Analogie der B_{ab}^i zu den Transformationskoeffizienten aus Abschnitt B.II.1

$$T_{b,\underline{x}_i} = \frac{1}{2} \epsilon_{bcf} (\underline{V}_i t_{ac}) t_{af} \quad (D, 35)$$

ist offensichtlich, so daß die Übertragung von (D,32) sofort zu den Beziehungen (B,26) führt.

VI. Eigenschaften von S_1 , S_2 und Trägheitstensor bei (K=0)-Banden

a) Die bei der Lösung des (K=0)-Problems auftretenden Funktionen

$$S_{1,2}(x) = \frac{1}{\Theta_{cr}} \frac{\hbar}{i} \sum_{n \neq 0} \frac{\Psi_n(x)}{\Psi_0(x)} \frac{\langle n | j_{1,2} | 0 \rangle}{E_n - E_0} \quad (D, 36)$$

(Die Bezeichnung ist hier vereinheitlicht sowohl für das Rotor + Particle - Modell als auch für gg-Kerne)

sind reell, weil die Wellenfunktion Ψ_0 des nichtentarteten Ausgangszustandes und die Wellenfunktionen Ψ_n der Zwischenzustände reell gewählt werden können. Bei dieser Phasenwahl werden dann die Matrixelemente $\langle n | j_{1,2} | 0 \rangle$ rein imaginär.

Bildet man die sphärischen Kombinationen

$$S_{\pm} = S_1 \pm i S_2 = \frac{1}{\Theta_{cr}} \frac{\hbar}{i} \sum_{n \neq 0} \frac{\Psi_n}{\Psi_0} \frac{\langle n | j_{\pm} | 0 \rangle}{E_n - E_0} \quad , \quad (D, 37)$$

so ist es dagegen zweckmäßig, die Zustände Ψ_n nicht mehr reell zu wählen, sondern nach den Eigenwerten von j_3 , also nach K zu klassifizieren. Man erkennt dann aus (D,37), daß wegen $j_3 \Psi_0 = 0$ für die Ψ_n nur (K=1)- bzw. (K=-1)-Zustände in Frage kommen, so daß wir erhalten :

$$j_3 S_{\pm} = \pm \hbar S_{\pm} \quad (D, 38)$$

Dies läßt sich in Real- und Imaginärteil trennen, was die Formeln

$$\frac{\hbar}{\hbar} j_3 S_1 = -S_2 \quad ; \quad \frac{\hbar}{\hbar} j_3 S_2 = S_1 \quad (D, 39)$$

ergibt.

b) Auch zur Berechnung von

$$(\Theta_{cr})_{ab} = 2 \sum_{n \neq 0} \frac{\langle 0 | j_a | n \rangle \langle n | j_b | 0 \rangle}{E_n - E_0} \quad (D, 40)$$

im axialsymmetrischen Fall ist es zweckmäßig, nach K klassifizierte Wellenfunktionen zu verwenden, wobei wir für die $(K=\pm 1)$ -Zwischenzustände $|n\rangle$ die Phasen so wählen, daß

$$\Psi_{-n} = \Psi_n^* \quad (D, 41)$$

gilt ($n \geq 0$ heißt für die zugehörigen K-Werte : $K=\pm 1$). Dann ergibt sich unter Verwendung von

$$j_+ = \frac{1}{2} (j_x + j_y) \quad ; \quad j_- = \frac{1}{2i} (j_x - j_y) \quad (D, 42)$$

die Formel

$$(\Theta_{cr})_{11} = (\Theta_{cr})_{22} = 2 \left(\sum_{n>0} \frac{1}{4} \frac{\langle 0 | j_- | n \rangle \langle n | j_+ | 0 \rangle}{E_n - E_0} + \sum_{n<0} \frac{1}{4} \frac{\langle 0 | j_+ | n \rangle \langle n | j_- | 0 \rangle}{E_n - E_0} \right) \quad (D, 43)$$

Mit Hilfe von

$$\langle -n | j_{\mp} | 0 \rangle = - \langle n | j_{\pm} | 0 \rangle \quad (D, 44)$$

erhalten wir das Ergebnis

$$(\Theta_{cr})_{11} = (\Theta_{cr})_{22} = \sum_{n>0} \frac{|\langle n | j_+ | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0} \quad (D, 45)$$

Ebenso ergibt sich :

$$(\Theta_{cr})_{12} = 2 \left(\sum_{n>0} \frac{1}{4i} \frac{\langle 0 | j_- | n \rangle \langle n | j_+ | 0 \rangle}{E_n - E_0} - \sum_{n<0} \frac{1}{4i} \frac{\langle 0 | j_+ | n \rangle \langle n | j_- | 0 \rangle}{E_n - E_0} \right),$$

woraus mit (D, 44) folgt :

$$(\Theta_{cr})_{12} = (\Theta_{cr})_{21} = 0 \quad (D, 46)$$

VII. Zur Transformation des körperfesten Systems im Rotor + Particle - Modell

Aus (B,7) entnimmt man die Größen ($q_j \hat{=} x_{1a}$)

$$M_{x_{ia}x_{jb}}^{-1} = \frac{1}{m} \delta_{ij} \delta_{ab} + \frac{1}{\Theta_0} (\varepsilon_{1ca} x_{ic} \varepsilon_{1fb} x_{jf} + \varepsilon_{2ca} x_{ic} \varepsilon_{2fb} x_{jf})$$

$$A_{x_{ia},1} = -\frac{2}{\Theta_0} \varepsilon_{1ba} x_{ib} \quad ; \quad A_{x_{ia},3} = 0 \quad (D,47)$$

$$\Theta_{11}^{-1} = \Theta_{22}^{-1} = \frac{1}{\Theta_0} \quad ; \quad \text{sonst} \quad \Theta_{ab}^{-1} = 0$$

Damit lassen sich dann die entsprechenden transformierten Größen mit den Transformationsformeln (A,29) errechnen, wobei wir die Abkürzung (B,24) verwenden :

$$\tilde{M}_{x_{ia}x_{jb}}^{-1} = M_{x_{ia}x_{jb}}^{-1}$$

$$\tilde{A}_{x_{ia},b} = \frac{2}{\Theta_0} [\varepsilon_{1ca} x_{ic} (T_{b,1} - t_{1b}) + \varepsilon_{2ca} x_{ic} (T_{b,2} - t_{2b})] + \frac{2}{m} T_{b,x_{ia}}$$

$$\tilde{\Theta}_{ab}^{-1} = \frac{1}{\Theta_0} [(T_{a,1} - t_{1a})(T_{b,1} - t_{1b}) + (T_{a,2} - t_{2a})(T_{b,2} - t_{2b})] + \frac{1}{m} T_{a,x_{ic}} T_{b,x_{ic}} \quad (D,48)$$

Auf die Angabe von $N_{x_{ia}}$ und G_a , die die hermitische Ergänzung liefern, verzichten wir hier, da diese Größen ohne Schwierigkeiten mit $\sqrt{g} = 1$ aus (A,17) bestimmt werden können.

Der neue Trägheitstensor in (D,48) läßt sich in den Eulerschen Winkeln $\alpha(x)$, $\beta(x)$, $\gamma(x)$ ausdrücken, indem wir berücksichtigen, daß die Drehmatrix t_{ab} durch (D,1) gegeben ist. In D.V sind außerdem bereits die Formeln (B,26) für T_{a,x_i} begründet, aus denen man entnimmt :

$$T_{1,a} = -\sin\beta \cos\gamma \left(\frac{i}{\hbar} j_a \alpha\right) + \sin\gamma \left(\frac{i}{\hbar} j_a \beta\right)$$

$$T_{2,a} = \sin\beta \sin\gamma \left(\frac{i}{\hbar} j_a \alpha\right) + \cos\gamma \left(\frac{i}{\hbar} j_a \beta\right) \quad (D, 49)$$

$$T_{3,a} = \cos\beta \left(\frac{i}{\hbar} j_a \alpha\right) + \left(\frac{i}{\hbar} j_a \gamma\right)$$

So kommt man nach elementarer Rechnung auf die benötigte Kombination für (K=0)-Banden.:

$$\begin{aligned} \bar{\Theta}_{11}^{-1} + \bar{\Theta}_{22}^{-1} &= \frac{1}{m} \sum_i \left[\sin^2\beta (\nabla_i \alpha)^2 + (\nabla_i \beta)^2 \right] + \\ &+ \frac{1}{\Theta_0} \left[\sin^2\beta \left\{ \left(\frac{i}{\hbar} j_1 \alpha\right)^2 + \left(\frac{i}{\hbar} j_2 \alpha\right)^2 \right\} + \left(\frac{i}{\hbar} j_1 \beta\right)^2 + \left(\frac{i}{\hbar} j_2 \beta\right)^2 + \right. \\ &+ 2 \sin\beta \cos\beta \left(\cos\alpha \frac{i}{\hbar} j_1 \alpha + \sin\alpha \frac{i}{\hbar} j_2 \alpha \right) - \\ &\left. - 2 \left(-\sin\alpha \frac{i}{\hbar} j_1 \beta + \cos\alpha \frac{i}{\hbar} j_2 \beta \right) + 2 - \sin^2\beta \right] \end{aligned} \quad (D, 50)$$

VIII. Berechnung des Intrinsic-Hamiltonoperators

Aus der Formel (C,27)

$$p_i(\Phi_K^{\mathcal{F} \text{intr}}(x')|_{p.B.} |\mathcal{F}MK\rangle_\Omega) = [\underline{e}_a p'_{ia} + \underline{B}_a^i (\mathcal{F}_a - j'_a)] \Phi_K^{\mathcal{F} \text{intr}}|_{p.B.} |\mathcal{F}MK\rangle \quad (D,51)$$

erhalten wir durch Iteration

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2 (\Phi_K^{\mathcal{F} \text{intr}}|_{p.B.} |\mathcal{F}MK\rangle) &= \\ &= \left\{ \underline{e}_a \cdot \frac{1}{2m} [\underline{e}_b p'_{ib} + \underline{B}_b^i (\mathcal{F}_b - j'_b)] p'_{ia} + \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} (\nabla_i \underline{e}_a) p'_{ia} + \right. \\ &\quad + \underline{B}_a^i \cdot \frac{1}{2m} [\underline{e}_b p'_{ib} + \underline{B}_b^i (\mathcal{F}_b - j'_b)] (\mathcal{F}_a - j'_a) + \\ &\quad \left. + \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} (\nabla_i \underline{B}_a^i) (\mathcal{F}_a - j'_a) \right\} \Phi_K^{\mathcal{F} \text{intr}}|_{p.B.} |\mathcal{F}MK\rangle = \quad (D,52) \\ &= \left\{ \frac{1}{2m} p'_{ia} p'_{ia} + \frac{1}{2m} \underline{B}_{ba}^i [p'_{ib} (\mathcal{F}_a - j'_a) + (\mathcal{F}_a - j'_a) p'_{ib}] + \right. \\ &\quad + \frac{1}{2m} \underline{B}_a^i \underline{B}_b^i (\mathcal{F}_a - j'_a) (\mathcal{F}_b - j'_b) + \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} (\nabla_i \underline{B}_a^i) (\mathcal{F}_a - j'_a) \\ &\quad \left. + \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} \varepsilon_{abc} e_{b\mu} e_{f\mu} \underline{B}_{fc}^i p'_{ia} \right\} \Phi_K^{\mathcal{F} \text{intr}}|_{p.B.} |\mathcal{F}MK\rangle \end{aligned}$$

Der Ausdruck $(\mathcal{F}_a - j'_a) p'_{ib}$ läßt sich mit Hilfe von

$$[j'_a, p'_{ib}] = i\hbar \varepsilon_{abc} p'_{ic} \quad (D,53)$$

zu $p'_{ib}(\mathcal{F}_a - j'_a) - i\hbar \varepsilon_{abc} p'_{ic}$ umformen, wodurch der letzte Term in (D,52) kompensiert wird.

Außerdem ersetzen wir die Drehimpulse j'_a durch die körperfesten Komponenten (C,25), also

$$j'_a = e_{ca}(x') j_c^{KF'} \quad , \quad (D,54)$$

was neben der Substitution

$$j'_a \rightarrow j_a^{KF'}$$

zu den Zusatztermen

$$-\frac{1}{m} B_{ba}^i [p_{ib}, e_{ca}(x')] j_c^{KF'} = -\frac{\hbar}{im} B_{ba}^i \epsilon_{cfa} e_{fb}(x') e_{ha}(x') B_{hg}^i(x') j_c^{KF'}$$

und

$$\frac{1}{2m} (B_a^i B_b^i) [j_a^{KF'}, e_{cb}(x')] j_c^{KF'} = \frac{1}{2m} (B_a^i B_b^i) (-i\hbar) \epsilon_{acf} e_{fb}(x') j_c^{KF'}$$

führt, die auf dem physikalischen Bereich (wegen

$$e_{ba}(x')|_{p.B.} = \delta_{ba} \quad \text{und} \quad B_{ba}^i(x')|_{p.B.} = B_{ba}^i(x) \quad (D,55)$$

verschwinden.

Zur vollständigen Elimination der x-Koordinaten schreiben wir :

$$B_{ba}^i(x) = B_{ba}^i(x')|_{p.B.} = e_b(x') \cdot \underline{B}_a^i(x')|_{p.B.} = (\underline{B}_a^i)_b(x')|_{p.B.} \quad (D,56)$$

sowie

$$\underline{B}_a^i(x) \cdot \underline{B}_b^i(x) = B_{ca}^i(x) B_{cb}^i(x) = \underline{B}_a^i(x') \cdot \underline{B}_b^i(x')|_{p.B.} \quad (D,57)$$

Aus der Umformung

$$\begin{aligned} \nabla_i \underline{B}_a^i &= (e_c F_{c,i}^j \frac{\partial}{\partial q_j} + e_c B_{cf}^i \frac{i}{\hbar} \mathcal{F}_f) (e_b B_{ba}^i) = \\ &= F_{b,i}^j \frac{\partial B_{ba}^i}{\partial q_j} + e_{fbc} B_{cf}^i B_{ba}^i \end{aligned} \quad (D,58)$$

ersieht man schließlich die Drehinvarianz von $\nabla_i \underline{B}_a^i$,
so daß wir erhalten :

$$\nabla_i \underline{B}_a^i(x) = \nabla_i' \underline{B}_a^i(x')|_{p.B.} \quad (D,59)$$

Dies führt dann für den Ausdruck (D,52) zu dem Ergebnis

$$\begin{aligned} &\left\{ \frac{1}{2m} \sum_i p_i'^2 + \frac{1}{m} \left[\underline{B}_a^i(x') \cdot p_i' + \frac{\hbar}{2i} \nabla_i' \underline{B}_a^i(x') \right] (\mathcal{F}_a - j_a^{KF'}) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2m} \underline{B}_a^i(x') \cdot \underline{B}_b^i(x') (\mathcal{F}_a - j_a^{KF'}) (\mathcal{F}_b - j_b^{KF'}) \right\} \Phi_K^{intr}|_{p.B.} | \mathcal{F} M \rangle, \end{aligned} \quad (D,60)$$

womit die für die Definition des Intrinsic-Hamilton-operators grundlegende Formel (C,29) abgeleitet ist.

IX. Zur Umrechnung von $H^{\mathcal{F}^{intr}}$ auf q' und Ω'

Die Beziehung (C,38)

$$p'_i = \underline{e}'_a F_{a,j}^{i'} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'_j} + \underline{e}'_a B_{ab}^{i'} j_b^{KF'} \quad (D,61)$$

läßt sich anwenden zur Berechnung des in $\mathcal{A}_a^{intr}$ vorkommenden Ausdrucks (vgl. auch (D,58)) $\nabla'_i \underline{B}_a^{i'}$:

$$\nabla'_i \underline{B}_a^{i'} = \frac{i}{\hbar} p'_i (\underline{e}'_b B_{ba}^{i'}) = F_{b,j}^{i'} \frac{\partial B_{ba}^{i'}}{\partial q'_j} + \varepsilon_{fbc} B_{cf}^{i'} B_{ba}^{i'}$$

Dabei haben wir von

$$[j_a^{KF'}, \underline{e}'_b] = -i\hbar \varepsilon_{abc} \underline{e}'_c$$

Gebrauch gemacht.

Unter Berücksichtigung von (D,61) erhalten wir deshalb die folgende Beziehung :

$$\begin{aligned} \frac{1}{m} (\underline{B}_a^{i'} \cdot p'_i + \frac{\hbar}{2i} \nabla'_i \underline{B}_a^{i'}) &= \frac{1}{m} B_{ba}^{i'} F_{b,j}^{i'} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'_j} + \\ &+ \frac{1}{m} B_{ca}^{i'} B_{cb}^{i'} j_b^{KF'} + \frac{\hbar}{2i} \frac{1}{m} (F_{b,j}^{i'} \frac{\partial B_{ba}^{i'}}{\partial q'_j} + \varepsilon_{bcf} B_{bc}^{i'} B_{fa}^{i'}) \end{aligned} \quad (D,62)$$

Greift man auf die Formeln (A,16b,c) zurück, so ergibt sich damit :

$$\begin{aligned} \frac{1}{m} (\underline{B}_a^{i'} \cdot p'_i + \frac{\hbar}{2i} \nabla'_i \underline{B}_a^{i'}) &= \\ &= \frac{\hbar}{2i} [A_{j,a}(q') \frac{\partial}{\partial q'_j} + G_a(q')] + \Theta_{ab}^{-1}(q') j_b^{KF'} \end{aligned} \quad (D,63)$$

wodurch die Beziehung (C,39) bewiesen ist. .

X. Modellrechnungen : Deformierter Oszillator

Als einfaches Modell zur Bestimmung von ψ_0^{intr} soll hier das deformierte Oszillatorpotential dienen.

Der deformierte Hamiltonoperator H_{def} (vgl. (C,139) oder (C,86)) schreibt sich dann als

$$H_{def}(x') = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i' + \frac{1}{2} m \sum_i (\omega_1^2 x_{i1}'^2 + \omega_2^2 x_{i2}'^2 + \omega_3^2 x_{i3}'^2) \quad (D,64)$$

Wir setzen Axialsymmetrie ($\omega_1 = \omega_2$) und prolata Deformation ($\omega_1 > \omega_3$) voraus.

Die Einteilchenzustände lassen sich dann charakterisieren durch die Oszillatorquanten n_1, n_2, n_3 mit der Einteilchenenergie

$$\mathcal{E}(n_1, n_2, n_3) = \hbar \omega_1 (n_1 + \frac{1}{2}) + \hbar \omega_2 (n_2 + \frac{1}{2}) + \hbar \omega_3 (n_3 + \frac{1}{2}) \quad (D,65)$$

Wegen der Axialsymmetrie kann man als Quantenzahl den Eigenwert m der Drehimpulskomponente j_3' einführen.

Die Zustände werden damit charakterisiert durch

$n = n_1 + n_2 + n_3$, n_3 und m , wobei $|m|$ die Werte $n - n_3$, $n - n_3 - 2, \dots, 0$ bzw. 1 annehmen kann.

Die Energie schreibt sich dann als

$$\mathcal{E}(n, n_3, m) = \hbar \omega_1 (n - n_3 + 1) + \hbar \omega_3 (n_3 + \frac{1}{2}) \quad (D,66)$$

Den Deformationsparameter δ definieren wir ebenso wie Nilsson [40] durch

$$\left(\frac{\omega_1}{\omega_3}\right)^2 = \frac{1 + \frac{2}{3}\delta}{1 - \frac{4}{3}\delta} \quad (D,67)$$

Die Volumenkonstanz besagt :

$$\omega_1 \omega_2 \omega_3 = \omega_1^2 \omega_3 = const. \equiv \omega_0^3 \quad (D,68)$$

a) Bosonen

Wenn wir eine Besetzung mit N Bosonen vornehmen, so ist der Grundzustand des Systems dadurch charakterisiert, daß alle Teilchen im Grundzustand des Oszillators mit $n_1=n_2=n_3=0$ sitzen (d.h. es gilt auch $m=0$) :

$$|0\rangle = |000\rangle_1 \dots |000\rangle_N \quad (D,69)$$

Die bei der Cranking-Formel bzw. den Formeln für S_1, S_2 vorkommenden Anregungszustände $|n\rangle$ findet man aus

$$j'_1|0\rangle = \sum_i (x'_{i2} p'_{i3} - x'_{i3} p'_{i2}) |0\rangle, \quad j'_2|0\rangle = \sum_i (x'_{i3} p'_{i1} - x'_{i1} p'_{i3}) |0\rangle,$$

woraus man ersieht, daß die normierten Anregungszustände

$$\begin{aligned} |101\rangle &:= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i |000\rangle_1 \dots |101\rangle_i \dots |000\rangle_N \\ |011\rangle &:= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i |000\rangle_1 \dots |011\rangle_i \dots |000\rangle_N \end{aligned} \quad (D,70)$$

auftreten. Es ergeben sich die Matrixelemente

$$\begin{aligned} \langle 011 | j'_1 | 0 \rangle &= \sqrt{N} \frac{i\hbar}{2} \left(\sqrt{\frac{\omega_2}{\omega_1}} - \sqrt{\frac{\omega_1}{\omega_3}} \right) \\ \langle 101 | j'_2 | 0 \rangle &= \sqrt{N} \frac{i\hbar}{2} \left(\sqrt{\frac{\omega_1}{\omega_3}} - \sqrt{\frac{\omega_3}{\omega_1}} \right) \end{aligned} \quad (D,71)$$

Aus den bekannten Oszillatorwellenfunktionen in Ortsdarstellung kann man entnehmen :

$$\begin{aligned} |101\rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \frac{2m}{\hbar} \sqrt{\omega_1 \omega_3} \sum_i x'_{i1} x'_{i3} \right) |0\rangle \\ |011\rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \frac{2m}{\hbar} \sqrt{\omega_1 \omega_3} \sum_i x'_{i2} x'_{i3} \right) |0\rangle \end{aligned} \quad (D,72)$$

Damit folgt :

$$\langle 0 | j'^2 | 0 \rangle = |\langle 101 | j'_2 | 0 \rangle|^2 + |\langle 011 | j'_1 | 0 \rangle|^2 = \frac{N \hbar^2 (\omega_1 - \omega_3)^2}{2 \omega_1 \omega_3} \quad (D,73)$$

sowie

$$\Theta_{cr} = 2 \frac{|\langle 011 | j'_1 | 0 \rangle|^2}{\hbar (\omega_1 + \omega_3)} = \frac{N \hbar (\omega_1 - \omega_3)^2}{2 \omega_1 \omega_3 (\omega_1 + \omega_3)} \quad (D,74)$$

und für die Funktionen S_1 und S_2 :

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{1}{\Theta_{cr}} \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\hbar(\omega_1 + \omega_3)} \langle 011 | j'_1 | 0 \rangle \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \frac{2m}{\hbar} \sqrt{\omega_1 \omega_3} \sum_i x'_{i2} x'_{i3} \right) \\ &= - \frac{2m \omega_1 \omega_3}{N \hbar (\omega_1 - \omega_3)} \sum_i x'_{i2} x'_{i3} \end{aligned} \quad (D, 75a)$$

und entsprechend :

$$S_2 = \frac{2m \omega_1 \omega_3}{N \hbar (\omega_1 - \omega_3)} \sum_i x'_{i1} x'_{i3} \quad (D, 75b)$$

Daraus erhalten wir dann :

$$\frac{i}{\hbar} j'_1 S_2 = \frac{2m \omega_1 \omega_3}{N \hbar (\omega_1 - \omega_3)} \sum_i (x'^2_{i3} - x'^2_{i2}) \quad (D, 76)$$

$$\frac{i}{\hbar} j'_1 S_2 = \frac{i}{\hbar} j'_2 S_1 = \frac{2m \omega_1 \omega_3}{N \hbar (\omega_1 - \omega_3)} \sum_i x'_{i1} x'_{i2}$$

Führen wir die zu (D, 70) analogen Zwischenzustände $|200\rangle$, $|020\rangle$, $|002\rangle$, $|110\rangle$ ein, so läßt sich schreiben :

$$\begin{aligned} \langle 0 | \left(\frac{i}{\hbar} j'_1 S_1 \right)^2 | 0 \rangle - 1 &= \\ &= | \langle 002 | \frac{i}{\hbar} j'_1 S_1 | 0 \rangle |^2 + | \langle 020 | \frac{i}{\hbar} j'_1 S_1 | 0 \rangle |^2 \end{aligned}$$

und wir erhalten nach elementarer Rechnung :

$$\begin{aligned} \langle 0 | \left(\frac{i}{\hbar} j'_1 S_1 \right)^2 | 0 \rangle - 1 &= \langle 0 | \left(\frac{i}{\hbar} j'_2 S_2 \right)^2 | 0 \rangle - 1 = \\ &= \frac{2(\omega_1^2 + \omega_3^2)}{N(\omega_1 - \omega_3)^2} = \frac{\hbar^2}{\langle j'^2 \rangle} \left(\frac{\omega_1}{\omega_3} + \frac{\omega_3}{\omega_1} \right) \end{aligned} \quad (D, 77a)$$

und

$$\begin{aligned} \langle 0 | \left(\frac{i}{\hbar} j'_1 S_2 \right)^2 | 0 \rangle &= \langle 0 | \left(\frac{i}{\hbar} j'_2 S_1 \right)^2 | 0 \rangle = \\ &= \frac{\omega_1 \omega_3}{N(\omega_1 - \omega_3)^2} = \frac{\hbar^2}{2 \langle j'^2 \rangle} \end{aligned} \quad (D, 77b)$$

b) Fermionen

Das Besetzen aller Oszillatorniveaus von unten ergibt den Grundzustand $|0\rangle$ (Slaterdeterminante).

Es ist hier zweckmäßig, die "Besetzungszahlen"

$$N_1 = \sum_{i \text{ bes.}} (n_{1i} + \frac{1}{2}), N_2 = \sum_{i \text{ bes.}} (n_{2i} + \frac{1}{2}), N_3 = \sum_{i \text{ bes.}} (n_{3i} + \frac{1}{2}) \quad (\text{D, 78})$$

einzuführen (i charakterisiert jetzt die einzelnen Einteilchenzustände), womit sich die Gesamtenergie in der Form

$$E = \sum_{i \text{ bes.}} \varepsilon(n_{1i}, n_{2i}, n_{3i}) = \hbar (N_1 \omega_1 + N_2 \omega_2 + N_3 \omega_3) \quad (\text{D, 79})$$

schreibt.

Das übliche Vorgehen besteht darin, die Deformation so zu wählen, daß die Energie E nach (D,79) minimal wird bei Variation der $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ unter Beachtung der Volumenbedingung (D,68). Dies führt zu den Bedingungen der "Gleichgewichtsdeformation" (vgl. z.B. [59]) :

$$N_1 \omega_1 = N_2 \omega_2 = N_3 \omega_3 \quad (\text{D, 80})$$

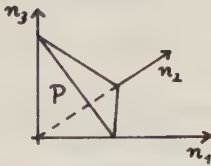
Verständlicher wäre es, sich $\omega_1, \omega_2, \omega_3$, also im wesentlichen die Deformation sowie die Teilchenzahl N vorzugeben und daraus die Besetzungszahlen N_1, N_2, N_3 zu berechnen. Wir zeigen im folgenden, daß dieses Vorgehen ebenfalls, zumindest näherungsweise, auf die Bedingungen (D,80) führt.

Bei vorgegebenen $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ können wir mit Hilfe der Fermienergie ε_F für die Quantenzahlen der besetzten Niveaus schreiben :

$$\hbar (\omega_1 n_1 + \omega_2 n_2 + \omega_3 n_3) \leq \varepsilon_F - \frac{1}{2} \hbar (\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) =: \tilde{\varepsilon}_F \quad (\text{D, 81})$$

Bei genügend großer Teilchenzahl läßt sich somit die Zahl der besetzten Niveaus mit dem Volumen des durch

die Ungleichung (D,81) und $n_1, n_2, n_3 \geq 0$ bestimmten Gebiets im (n_1, n_2, n_3) -Raum identifizieren (dreieckige



Pyramide P, s. nebenstehende Abbildung).

Daraus ergibt sich, wenn wir die Achsenabschnitte mit $(n_k)_{\max} = \frac{\tilde{\epsilon}_F}{\hbar \omega_k}$ bezeichnen:

$$N = \frac{1}{6} (n_1)_{\max} (n_2)_{\max} (n_3)_{\max} = \frac{\tilde{\epsilon}_F^3}{6 \hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} \quad (\text{D},82)$$

oder

$$\tilde{\epsilon}_F = \hbar (6N \omega_1 \omega_2 \omega_3)^{\frac{1}{3}} = \hbar \omega_0 (6N)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{D},83)$$

Die entsprechende geometrische Überlegung liefert nun auch:

$$N_1 = \int_{(P)} \left(n_1 + \frac{1}{2}\right) dn_1 dn_2 dn_3 = \frac{\tilde{\epsilon}_F^4}{24 \hbar^4 \omega_1^2 \omega_2 \omega_3} + \frac{\tilde{\epsilon}_F^3}{12 \hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3}$$

oder ($k = 1, 2, 3$)

$$N_k = \frac{\tilde{\epsilon}_F^3}{24 (\hbar \omega_0)^3} \left(\frac{\tilde{\epsilon}_F}{\hbar \omega_k} + 2 \right) \quad (\text{D},84)$$

Mit (D,83) schreibt sich dies beispielsweise als

$$N_3 = \frac{1}{4} N \left[\frac{\omega_0}{\omega_3} (6N)^{\frac{1}{3}} + 2 \right] \quad , \quad (\text{D},85)$$

woraus man ersieht, daß die Besetzungszahlen von derselben Größenordnung oder sogar wesentlich größer als die Teilchenzahl sind. (Von dieser Tatsache haben wir bei der Diskussion im Anschluß an (C,77) Gebrauch gemacht.)

Außerdem besagt (D,84), daß folgendes gilt ($k = 1, 2, 3$; keine Summation über k):

$$N_k \omega_k = \frac{1}{4} N (6N)^{\frac{1}{3}} \omega_0 \left[1 + \frac{2\omega_k}{\omega_0 \sqrt[3]{6N}} \right] \approx \frac{1}{4} \sqrt[3]{6} N^{\frac{2}{3}} \left[1 + \frac{2}{\sqrt[3]{6N}} \right], \quad (\text{D},86)$$

so daß (für genügend große Teilchenzahl) die Besetzungsbedingungen (D,80) erfüllt sind.

Zur Berechnung von Erwartungswerten wie $\langle 0 | \hat{J}^2 | 0 \rangle$ kann man mit Vorteil von einer von Lipkin [60] angegebenen Methode Gebrauch machen, die es gestattet, besonders beim Oszillator, Matrixelemente von Mehrteilchenoperatoren einfach zu berechnen. So erhält man etwa (vgl. [59]) :

$$\langle \hat{J}^2 \rangle = \langle 0 | \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 | 0 \rangle = \hbar^2 \left[N_3 \left(\frac{\omega_1}{\omega_3} + \frac{\omega_2}{\omega_1} \right) - (N_1 + N_2) \right] \quad (\text{D},87)$$

Setzen wir hier die Bedingungen (D,80) ein, also

$$N_1 = N_2 = N_3 \frac{\omega_3}{\omega_1}, \quad \text{so ergibt sich :}$$

$$\frac{1}{\hbar^2} \langle \hat{J}^2 \rangle = N_3 \frac{\omega_1^2 - \omega_3^2}{\omega_1 \omega_3} \quad (\text{D},88)$$

Die Definitionsgleichung (D,67) für δ besagt :

$$\frac{\omega_1}{\omega_3} = 1 + \delta + \frac{5}{6} \delta^2 + O(\delta^3) \quad (\text{D},89)$$

woraus wir durch Einsetzen in (D,88) erhalten :

$$\frac{1}{\hbar^2} \langle \hat{J}^2 \rangle = 2 N_3 \cdot \delta \cdot \left[1 + \frac{1}{3} \delta + O(\delta^2) \right] \approx 2 N_3 \delta \quad (\text{D},90)$$

Aus dem Cranking-Trägheitsmoment (vgl. z.B. [7])

$$\Theta_{cr} = \frac{\hbar}{4} \left[\frac{(\omega_1 - \omega_3)^2}{\omega_1 \omega_3 (\omega_1 + \omega_3)} (2N_3 + N_1 + N_2) + \frac{(\omega_1 + \omega_3)^2}{\omega_1 \omega_3 (\omega_1 - \omega_3)} (2N_3 - N_1 - N_2) \right]$$

ergibt sich durch Einsetzen von (D,80) bekanntlich

$$\Theta_{cr} = \frac{\hbar N_3 (\omega_1^2 + \omega_3^2)}{\omega_1^2 \omega_3} = \hbar \left(\frac{N_1}{\omega_1} + \frac{N_2}{\omega_3} \right) = \Theta_{starr} \quad (\text{D},91)$$

XI. Zur Untersuchung der Mittelungsnäherung

Ausgehend von (C,137)

$$\begin{aligned} M &\equiv \langle F \cdot \frac{1}{\hbar} j'_i S_i \rangle - \langle F \rangle = \\ &= \frac{1}{\theta_{cr}} \sum_{n \neq 0} \frac{1}{E_n - E_0} \langle 0 | (F - \langle F \rangle) j'_i + j'_i (F - \langle F \rangle) | n \rangle \langle n | j'_i | 0 \rangle \end{aligned} \quad (D,92)$$

ergibt die Einführung von H_{def} nach (C,139)

$$\begin{aligned} M &\approx \frac{1}{\theta_{cr}} \frac{1}{(\Delta E)^2} \langle 0 | \{ (F - \langle F \rangle) j'_i + j'_i (F - \langle F \rangle) \} [H_{def}, j'_i] | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{2\theta_{cr}} \frac{1}{(\Delta E)^2} \langle 0 | [(F - \langle F \rangle) j'_i + j'_i (F - \langle F \rangle), [H_{def}, j'_i]] | 0 \rangle \end{aligned} \quad (D,93)$$

Dabei haben wir von

$$\langle 0 | j'_i | n \rangle = \langle n | j'_i | 0 \rangle^* = - \langle n | j'_i | 0 \rangle \quad (D,94)$$

und der entsprechenden Beziehung für $(F - \langle F \rangle) j'_i + j'_i (F - \langle F \rangle)$ Gebrauch gemacht.

(In (D,94) geht wesentlich die Möglichkeit ein, die Zwischenzustände $|n\rangle$ ebenso wie $|0\rangle$ reell zu wählen.)

Aus (D,93) folgt weiter mit Hilfe der Tatsache, daß F ein lokaler Operator (eine Funktion) ist :

$$\begin{aligned} M &\approx \frac{1}{\theta_{cr}} \frac{1}{(\Delta E)^2} \langle 0 | (F - \langle F \rangle) [j'_i, [H_{def}, j'_i]] | 0 \rangle \\ &\approx \frac{1}{\theta_{cr}} \frac{1}{(\Delta E)^2} \sum_{n \neq 0} \langle 0 | F - \langle F \rangle | n \rangle (E_n - E_0) \langle n | [j'_i, [H_{def}, j'_i]] | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\theta_{cr}} \frac{1}{(\Delta E)^3} \langle 0 | (F - \langle F \rangle) [H_{def}, [j'_i, [H_{def}, j'_i]]] | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{2\theta_{cr}} \frac{1}{(\Delta E)^3} \langle 0 | [F, [H_{def}, [j'_i, [H_{def}, j'_i]]]] | 0 \rangle \end{aligned} \quad (D,95)$$

Dabei haben wir die zu (D,94) analoge Beziehung

$$\langle n | F - \langle F \rangle | 0 \rangle = \langle 0 | F - \langle F \rangle | n \rangle^* = \langle 0 | F - \langle F \rangle | n \rangle$$

(entsprechend für $[j'_i, [H_{def}, j'_i]]$) benutzt.

Die weitere Umformung von (D,95) ergibt :

$$M \approx \frac{1}{2\theta_{cr}} \frac{1}{(\Delta E)^3} \langle 0 | [[F, H_{def}], [j'_i, [H_{def}, j'_i]]] | 0 \rangle \quad (D, 96)$$

Aus

$$H_{def} = \frac{1}{2m} \sum_i p_i'^2 + V_{def}$$

folgt

$$[F, H_{def}] = \frac{i\hbar}{2m} \{ p_i' \cdot (\nabla_i' F) + (\nabla_i' F) \cdot p_i' \} \quad (D, 97)$$

und

$$[j'_i, [H_{def}, j'_i]] = -j_i'^2 (V_{def}) \quad , \quad (D, 98)$$

woraus sich schließlich durch Einsetzen in (D,96) die Formel

$$M \approx \frac{1}{\theta_{cr}} \frac{1}{(\Delta E)^3} \langle 0 | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i' (j_i'^2 V_{def}) \nabla_i' F | 0 \rangle \quad (D, 99)$$

ergibt.

Literaturverzeichnis

- 1) A. Bohr, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk. 26 ,
No.14 (1952)
- 2) A. Bohr und B.R. Mottelson, Mat.Fys.Medd.Dan.
Vid.Selsk. 27 , No.16 (1953)
- 3) A. Bohr, Rotational States of Atomic Nuclei,
Munksgaard, Kopenhagen 1954
- 4) G. Süßmann, Z.Physik 139 , 543 (1954)
- 5) D.R. Inglis, Phys.Rev. 96, 1059 (1954)
- 6) D.R. Inglis, Phys.Rev. 103, 1786 (1956)
- 7) A. Bohr und B.R. Mottelson, Mat.Fys.Medd.Dan.
Vid.Selsk. 30 , No.1 (1955)
- 8) G. Lüders, Z.Naturforsch. 11a, 617 (1956)
- 9) H.J. Lipkin, A. De-Shalit, I. Talmi, Phys.Rev.
103 , 1773 (1956)
- 10) R.S. Nataf, Nucl.Phys. 2 , 497 (1957)
- 11) F. Villars, Nucl.Phys. 3 , 240 (1957)
- 12) F. Villars, Ann.Rev.Nucl.Sci. 7 , 185 (1957)
- 13) F. Villars, Ann.Phys. 5 , 224 (1958)
- 14) T.H.R. Skyrme, Proc.Phys.Soc. A70, 433 (1957)
- 15) R.E. Peierls und J. Yoccoz, Proc.Phys.Soc. A70,
381 (1957)

- 16) A. Bohr und B.R. Mottelson, K.Norske Vid.Selsk.
Forh. 31 , Nr.12 (1953)
- 17) D.J. Thouless und J.G. Valatin, Nucl.Phys. 31 ,
211 (1962)
- 18) T. Kammuri, Progr.Theor.Phys. 37, 1131 (1967)
- 19) A. Klein und A.K. Kerman, Phys.Rev. 138 ,
B 1323 (1965)
- 20) A. Klein, L. Celenza und A.K. Kerman, Phys.Rev.
140 , B 245 (1965)
- 21) A. Klein, M. Dreizler und R.E. Johnson,
Phys.Rev. 171 , B 1216 (1968)
- 22) F. Villars, Nucl.Phys. 74 , 353 (1965)
- 23) R.Y. Cusson, Nucl.Phys. A114, 289 (1968)
- 24) A. Kamlah, Z.Physik 216, 52 (1968)
- 25) R. Beck, H.J. Mang und P. Ring, Z.Physik 231 ,
26 (1970)
- 26) W. Scheid und W. Greiner, Ann.Phys. 48, 493 (1968)
- 27) J. Meyer, Nucl.Phys. A137, 193 (1969)
- 28) D.J. Rowe, Nucl.Phys. A152, 273 (1969)
- 29) Y. Shono, Progr.Theor.Phys. 44, 413 (1970)
- 30) W.A. Friedman und L. Wilets, Phys.Rev. C2 ,
892 (1970)
- 31) E.R. Marshalek und J. Weneser, Phys.Rev. C2 ,
1682 (1970)

- 32) F. Villars und G. Cooper, Ann.Phys. 56, 224 (1970)
- 33) F. Villars und N. Schmeing-Rogerson, Ann.Phys. 63 , 443 (1971)
- 34) D. Goss, Phys.Rev. C4, 1109 (1971)
- 35) J.O. Corbett, Nucl.Phys. A193, 401 (1972)
- 36) J.H. Hetherington, Nucl.Phys. A204, 110 (1973)
- 37) F.B. Morinigo, Nucl.Phys. A221, 608 (1974)
- 38) M. Brack und B.K. Jennings, Nucl.Phys. A258 , 264 (1976)
- 39) O.L. Weaver, R.Y. Cusson und L.C. Biedenharn, Preprint 1976
- 40) S.G. Nilsson, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk. 29 , No.16 (1955)
- 41) J.J. Griffin und M. Rich, Phys.Rev. 118, 850 (1960)
- 42) S.G. Nilsson und O. Prior, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid. Selsk. 32 , No.16 (1961)
- 43) H. Ruder und H. Volz, Z.Naturforsch. 23a , 1419 (1968)
- 44) H. Ruder und H. Volz, Z.Naturforsch. 24a , 1171 (1969)
- 45) H. Ruder, Z.Naturforsch. 28a , 206 (1973)
- 46) H. Ruder, Z.Naturforsch. 28a , 1500 (1973)
- 47) H. Näpfel, H. Ruder und H. Volz, Z.Naturforsch. 23a , 199 (1968)

- 48) E. Schrödinger, Ann.d.Physik 79, 361 (1926)
- 49) A. Weiguny, Z.Physik 186, 227 (1965)
- 50) M. Reinecke, Dissertation, Erlangen 1973
- 51) K. Dietrich, H.J. Mang und J. Pradal,
Z.Physik 190, 357 (1966)
- 52) S. Gartenhaus und C. Schwartz, Phys.Rev. 108,
482 (1957)
- 53) H.J. Lipkin, Ann.Phys. 9, 272 (1960); 12,452 (1961)
- 54) H.J. Lipkin, Brandeis Univ. Summer Inst. Theor.
Phys. Lecture Notes (1959)
- 55) F. Villars, Rend.d. Scuola Intern."E.Fermi"
XXXVI , Academic Press, New York 1966
- 56) F.S. Stephens und R.S. Simon, Nucl.Phys. A183 ,
257 (1972)
- 57) A. Messiah, Quantum Mechanics II , Appendix C.IV,
North-Holland, Amsterdam 1969
- 58) M.E. Rose, Elementary Theory of Angular
Momentum, Wiley, New York 1966
- 59) H.J. Lipkin und S. Goldstein, Nucl.Phys. 5 ,
202 (1958)
- 60) H.J. Lipkin, Phys.Rev. 108, 191 (1957)

Lebenslauf

Am 5. Januar 1950 wurde ich, Heinz Herold, als Sohn des Bundesbahnbeamten Johann Herold und dessen Ehefrau Hedwig Babette Herold, geb. Schlund, in Nürnberg geboren und evangelisch getauft.

Ab September 1956 besuchte ich die Volksschule an der Amberger Straße und nach Umzug meiner Eltern die Volksschule an der Dunantstraße in Nürnberg.

Im September 1960 trat ich in das Neue Gymnasium Nürnberg ein, wo ich auch im Juli 1968 mit dem Abitur die Hochschulreife erlangte.

Im Wintersemester 1968/69 begann ich an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg mein Physikstudium. Am 17. 10. 1970 legte ich die Diplom-Vorprüfung und am 17. 5. 1973 die Diplom-Hauptprüfung für Physik mit Erfolg ab.

Nachdem ich bereits ab Mai 1970 am Mathematischen Institut und in der Theoretischen Physik als studentische Hilfskraft beschäftigt war, wurde ich ab 1. 6. 1973 wissenschaftliche Hilfskraft am Institut für Theoretische Physik. Seit 1. 9. 1975 bin ich dort Verwalter der Dienstgeschäfte eines wissenschaftlichen Assistenten.

Offsetdruck-Fotodruck

J. Hogl, 8520 Erlangen, Hauptstr. 109 (Nähe Martin-Luther-Platz) Tel. 22990